第 54 卷 第 3 期 2005 年 3 月
1000-3290/2005/54(03)/1113-05

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.54,No.3,March,2005

反常扩散与分数阶对流-扩散方程*

常福宣† 陈 进 黄 薇

(长江水利委员会长江科学院,武汉 430010)

(2004 年 1 月 7 日收到;2004 年 6 月 16 日收到修改稿)

反常扩散现象在自然界和社会系统中广泛存在.考虑了扩散过程的时间相关和时空相关性,用非局域性的处理方法,在传统的二阶对流-扩散方程基础上,得到了分数阶对流-扩散方程,以此方程来描述反常扩散.在此方程中,弥散项和对时间的导数为分数阶导数所代替.由此分数阶对流-扩散方程,对传统的费克扩散定律进行推广,得到了广义的分数费克扩散定律,分数费克扩散定律说明某时刻空间中某点的流量不仅与其领域内的浓度梯度有关,而且与整个空间中其他不同点的粒子浓度、浓度变化的历史,甚至初始时刻的浓度有关.讨论了方程的解——分数稳定分布,并由此说明了扩散运动的平均平方位移是运移时间的非线性函数.

关键词:扩散,分数阶微积分,稳定分布(Lévy 分布),费克扩散定律

PACC:0560

1. 引 言

近年来,反常扩散现象引起了人们的广泛注意,在半导体、核磁共振、多孔介质、高分子聚合物、湍流、固体表面扩散、胶体中的输运、量子光学、分子光谱、经济金融,甚至于鸟类的滑翔等研究中得到了广泛应用[1].对于正常扩散,用二阶对流-扩散方程来描述.其柯西问题的格林函数解可以解释为随时间演化的而在空间上表现为正态分布密度函数.正常扩散粒子的运动为布朗运动,其平均平方位移(位移平方的均值)是运移时间 t 的线性函数:

$$< X^2(t) > = 2Dt, \tag{1}$$

其中 D 为扩散系数.布朗运动本质上是一种马尔科夫局域性的运动.而对于反常扩散,则是非马尔科夫非局域性的运动.因此,反常扩散必须考虑运动过程的时间相关性和空间相关性,由此可以引入分数阶微积分,运用分数阶微分方程来处理.如考虑时间相关性,则可以得到对时间分数微分的反常扩散方程[2—5],考虑空间相关性,则可以得到对空间分数微分的反常扩散方程[6,7].在这种考虑时空相关性的处理方法中,粒子的扩散运动不再是布朗运动,其平均平方位移是运移时间的非线性函数[8]:

$$< X^2(t) > \sim t^{\beta}. \tag{2}$$

Giona 和 Benson 等人曾分别讨论了对时间和空间分数微分的反常扩散方程.下面将同时考虑时间相关性和空间相关性,以此推导出对时间和空间分数阶微分的对流-扩散方程.

2. 非局域处理

传统的正常扩散运动采用以下二阶对流-扩散方程描述:

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = \nabla \cdot [-vC(x,t) + D\nabla C(x,t)], \tag{3}$$

其中 $C(x,t)$为在时刻 t 位于空间点 x 处的粒子浓度,v 为对流速度,D 为扩散系数.这一方程是在下面的连续方程(4)式和费克扩散定律(5)式的基础上建立起来的:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot J, \tag{4}$$

$$J = D\nabla C. \tag{5}$$

为讨论方便,(5)式中未考虑对流项.费克扩散本质上是局域扩散,即空间中某点的通量 J 与该点小范围内的浓度梯度成正比,而不考虑其他地方粒子运

* 国家自然科学基金(批准号:50339010)和国家重点基础研究发展规划项目(批准号:2003CB415202)资助的课题.

† 通讯联系人.E-mail:changfuxuan@sina.com 或 Changfx@cjw.com.cn

移的影响,也不考虑历史的影响.但在复杂的系统中,不同时刻的粒子运动及不同空间点的粒子运动相互影响,这就要求在研究某一时刻空间中某一点的粒子运动时,必须考虑其他时刻其他空间点的粒子运动影响.在此在时间和空间上分别考虑相关性,但不考虑时间和空间上的耦合作用,对传统的二阶扩散方程在时空上采用非局域性的处理方法,可以得出分数阶微分的反常扩散方程.为了便于说明,先考虑一维情况,所得结果可以很容易地推广到高维情形.将局域性的(5)式修改为粒子通量与浓度之间的非局域性关系:

$$\int_0^t \mathrm{d}\tau \int_0^x J(x',t)\mathrm{d}x' = \int_0^t \mathrm{d}\tau \int_0^x k(x,x';t,\tau)C(x',\tau)\mathrm{d}x', \tag{6}$$

其中 $k(x,x';t,\tau)$ 为扩散核函数,由于不考虑时间和空间上的耦合作用,所以可以将扩散核函数写为 $k(x,x';t,\tau)=k_x(x,x')k_t(t,\tau)$,不失一般性,在此认为扩散在空间上是统计均匀的,在时间上为平稳随机的,则空间扩散核函数 $k_x(x,x')$ 将仅是 $(x-x')$ 的函数,时间扩散核函数 $k_t(t,\tau)$ 仅是 $(t-\tau)$ 的函数.假定其形式为负幂率函数:

$$k_x(x,x') = \frac{D}{\Gamma(-\alpha)}\frac{1}{(x-x')^{\alpha-1}}, \tag{7}$$

$$k_t(t,\tau) = \frac{1}{\Gamma(\gamma)}\frac{1}{(t-\tau)^{1-\gamma}}, \tag{8}$$

其中 D,α,γ 为常数,$\Gamma(-\alpha)\Gamma(\gamma)$ 为伽马函数.将(7)和(8)式代入(6)式,并将(6)式等号两边对 x 和 t 求导,可得

$$J = D\frac{1}{\Gamma(\gamma)}\frac{\partial}{\partial t}\int_0^t \frac{1}{(t-\tau)^{1-\gamma}}\mathrm{d}\tau \frac{1}{\Gamma(-\alpha)}\frac{\partial}{\partial x} \times \int_0^x \frac{1}{(x-x')^{\alpha-1}}C(x',\tau)\mathrm{d}x'. \tag{9}$$

由 Rieman-Liouvill 分数阶导数的定义[9],可得

$$j = D\frac{\partial^{1-\gamma}}{\partial t^{1-\gamma}}\frac{\partial^{\alpha-1}}{\partial x^{\alpha-1}}C(x,t). \tag{10}$$

将(10)式代入(4)式,可得分数阶扩散方程为

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^{1-\gamma}}{\partial t^{1-\gamma}}\frac{\partial^{\alpha}}{\partial x^{\alpha}}C(x,t). \tag{11}$$

由分数阶导数的乘法规则[9],可得

$$\frac{\partial^{\gamma}}{\partial t^{\gamma}}C(x,t) = D\frac{\partial^{\alpha}}{\partial x^{\alpha}}C(x,t). \tag{12}$$

这样就得到了未考虑对流的反常扩散方程.与传统的二阶对流-扩散方程相比,在此方程中,弥散项和对时间的导数为分数阶导数所代替.

3. 分数费克扩散定律

费克扩散定律在不同的领域有不同的名称,当 C 为温度时,称为傅里叶定律;当 C 为压力时,称为达西定律;当 C 为粒子浓度时,则称为费克定律.费克扩散定律(5)式是一个唯象定律,它来自实验总结,而非基本的定理或其推论,不像连续方程(4)来自质量守恒,质量守恒定律是自然界的基本定律.因此,本文将对费克扩散定律(5)式进行讨论.费克扩散定律说明空间中某点的粒子通量 J 与该点小范围内的浓度梯度成正比.通过前面在时空上采用非局域性处理方法,得到粒子通量 J 是浓度对时间和空间的分数阶导数,并得到反常扩散方程(12).

事实上,方程(12)可以向更一般的反常扩散方程推广[10,11]:

$${}_tD_*^{\gamma}C(x,t) = D\times {}_xD_{\theta}^{\alpha}C(x,t), \tag{13}$$

其中 D 为一参数,正如(3)式中的扩散系数 D,算符 ${}_tD_*^{\gamma}$ 为对时间的 γ 阶 Caputo 分数阶导数,Caputo 分数阶导数与常见的 Riemann-Liouville 分数阶导数 $\frac{\partial^{\gamma}}{\partial t^{\gamma}}$ 之间存在以下关系:

$${}_tD_*^{\gamma}f(t) = \frac{\partial^{\gamma}}{\partial t^{\gamma}}f(t) + f(0)\frac{t^{-\gamma}}{\Gamma(1-\gamma)}, \tag{14}$$

而算符 ${}_xD_{\beta}^{\alpha}$ 为对空间的 Feller 分数阶导数,即

$${}_xD_{\theta}^{\alpha}f(x) = \left[C_+\frac{\partial^{\alpha}}{\partial x^{\alpha}} + C_-\frac{\partial^{\alpha}}{\partial(-x)^{\alpha}}\right]C(x,t), \tag{15}$$

其中

$$C_{\pm} = \frac{\sin[(\alpha\mp\theta)\pi/2]}{\sin\alpha\pi}, \tag{16}$$

且

$$\frac{\mathrm{d}^{\alpha}}{\mathrm{d}x^{\alpha}}f(x) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\int_{-\infty}^x \frac{1}{(x-x')^{\alpha-n+1}} \times f(x')\mathrm{d}x', \tag{17}$$

$$\frac{\mathrm{d}^{\alpha}}{\mathrm{d}(-x)^{\alpha}}f(x) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\int_x^{+\infty} \frac{1}{(x-x')^{\alpha-n+1}} \times f(x')\mathrm{d}x', \tag{18}$$

被称为正半轴和负半轴的 α 阶 Riemann-Liouville 分数阶导数(或称 Weyl 分数阶导数),其中 n 为一大于 α 的最小整数,$\alpha<n<\alpha+1$.(12)式可以看作(13)式当 $\theta=-\alpha$ 的特例.

由 Caputo 分数阶导数的乘法规则[10,11]可得与

(11)式相类似的形式,即

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = D \times {}_{t}D_{*}^{1-\gamma}\ {}_{x}D_{\theta}^{\alpha} C(x,t). \qquad (19)$$

由此可以重新定义通量 J,

$$J = D \times {}_{t}D_{*}^{1-\gamma}\ {}_{x}D_{\beta}^{\alpha-1} C(x,t). \qquad (20)$$

这可以看作是费克扩散定律的推广.由于通量是浓度对时间和空间的分数阶导数,因此称其为分数费克扩散定律.在(20)式中加上对流项,可得

$$J = (-v + D \times {}_{t}D_{*}^{1-\gamma}\ {}_{x}D_{\beta}^{\alpha-1}) C(x,t). \qquad (21)$$

下面更详细地讨论广义的分数费克扩散定律(20)式,以加深理解.

当 $\alpha = 2, \gamma = 1$ 时,由 Riemann-Liouville 分数阶导数和 Caputo 分数阶导数的定义,(20)式则为传统的费克扩散定律(5)式.因此费克扩散定律也可看作是分数费克扩散定律当 $\alpha = 2, \gamma = 1$ 时的特例.

当 $\alpha = 2$ 时,由(20)式和 Caputo 分数阶导数的定义:

$$J(x,t) = -\frac{D}{\Gamma(\gamma)} \frac{\partial}{\partial x}\Big[t^{\gamma-1} C(x,0) + \frac{\partial}{\partial t}\int_0^t (t-\tau)^{-1\gamma} C(x',t)\,\mathrm{d}\tau \Big]. \qquad (22)$$

由上式可以看出,通量 J 由两项组成,其中第一项与初值有关,从随机行走的角度,用连续时间随机行走(CTRW)[10] 理论分析,这是由于等待时间的拖尾(long-tail)分布,等待时间的数学期望为无穷大,初始时刻的浓度对所有时刻的通量都会产生影响;第二项则为浓度导数与扩散核函数的卷积,即与浓度变化的历史过程有关,扩散过程存在记忆性,粒子运动是非马尔柯夫性的.由于这种时间上的记忆性,使得粒子的扩散过程比正常扩散慢.

当 $\gamma = 1$ 时,由 Riemann-Liouville 分数阶导数定义,有

$$J(x,t) = \Big[\frac{C_+}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\int_{-\infty}^{x} \frac{C(x',t)}{(x-x')^{\alpha-n}}\mathrm{d}x' + \frac{C_-}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\int_{x}^{\infty} \frac{C(x',t)}{(x-x')^{\alpha-n}}\mathrm{d}x' \Big]. \qquad (23)$$

上式表明通量 J 与浓度之间存在空间上的非局域性关系,是浓度的 n 阶导数与扩散核函数的卷积.用连续时间随机行走理论分析,这是由于行走步长的拖尾分布,行走步长的方差为无穷大,使空间中某处的通量 J 会受到空间中所有点浓度变化的影响,其中出现两项是为了表示扩散的方向.由于这种空间中的相互关联性,使得粒子的扩散过程比正常扩散快.

因此,有两种作用引起反常扩散,由于时间相关性或者存在记忆性使得反扩散过程比正常扩散慢;而由于空间相关性或者非局域性使得其反扩散过程比正常扩散快.落实到实际的过程,就要看哪一种的作用强一些,具体而言,当 $\alpha > 2\gamma$(即 $2\gamma/\alpha < 1$)时,扩散过程比正常扩散慢,而当 $\alpha < 2\gamma$(即 $2\gamma/\alpha > 1$)时,扩散过程比正常扩散快.

4. 分数阶对流-扩散方程

将通量(21)式代入连续方程(4)可得如下分数阶对流-扩散方程:

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}[vC(x,t)] + D \times {}_{t}D_{*}^{1-\gamma}\ {}_{x}D_{\theta}^{\alpha} C(x,t), \qquad (24)$$

其中参数取值范围为 $0 < \alpha \leqslant 2, 0 < \gamma \leqslant 1, |\theta| \leqslant \alpha$(当 $0 < \alpha \leqslant 1$)或 $|\theta| \leqslant 2 - \alpha$(当 $1 < \alpha \leqslant 2$).当 $\alpha = 2$,$\gamma = 1$ 时,上式即为传统的二阶对流-扩散方程(3).而当 $0 < \alpha < 2, \gamma = 1$ 时,则为描述 Lévy 跃迁的对空间的分数阶对流-扩散方程:

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}[vC(x,t)] + D \times {}_{x}D_{\theta}^{\alpha} C(x,t). \qquad (25)$$

此方程的解 $C(x,t)$ 为稳定分布(或称 Lévy 分布)密度函数.当 $\alpha = 2, 0 < \gamma < 1$ 时,则为仅对时间的分数阶对流-扩散方程:

$$\frac{\partial C^{\gamma}(x,t)}{\partial t^{\gamma}} = -\frac{\partial}{\partial x}[vC(x,t)] + D\frac{\partial^2}{\partial x^2} C(x,t). \qquad (26)$$

值得注意的是(21)式与如下分数阶福克-普朗克方程不同[12]:

$$\frac{\partial C^{\gamma}(x,t)}{\partial t^{\gamma}} = \frac{\partial}{\partial x}[vC(x,t)] + D\frac{\partial^{\alpha}}{\partial x^{\alpha}} C(x,t). \qquad (27)$$

分数阶对流-扩散方程(24)用于描述随一外流场的系统中的反常扩散行为,此方程满足伽利略变换不变性[1];而分数阶福克-普朗克方程(27)则是描述受外力场作用下系统中的反常扩散行为,其中力场 $F(x) = -\mathrm{d}V(x)/\mathrm{d}x$ 在此方程中取常数 v,此方程不满足伽利略变换不变性.

5. 方程的格林函数解

下面求解分数阶对流-扩散方程(24)柯西问题

的格林函数解.为此设初始条件为

$$C(x,0) = \delta(x), \tag{28}$$

可以证明,方程(24)满足伽利略变换不变性[1],设 $C'(x, t)$为在不考虑对流情况下(即随对流场 v 一起运动的坐标系中来观察)的粒子浓度,即扩散方程中没有对流项:

$$\frac{\partial C'(x,t)}{\partial t} = D \times {}_tD_*^{1-\gamma} \frac{\partial^\alpha}{\partial x^\alpha} C'(x,t), \tag{29}$$

由伽利略变换不变性,在静止坐标系中观察的 $C(x, t)$与 $C'(x, t)$ 之间满足:

$$C(x,t) = C'(x - vt, t). \tag{30}$$

因此,只要解出了方程(29),就可得到分数阶对流-扩散方程(24)的解.

由 Caputo 分数阶导数${}_tD_*^\gamma$与 Riemann-Liouville 分数阶导数之间的关系(14)式,(29)式可以写为

$$\frac{\partial^\gamma C'(x,t)}{\partial t^\gamma} = D\frac{\partial^\alpha}{\partial x^\alpha} C'(x,t) + C'(0,x)\frac{t^{-\gamma}}{\Gamma(1-\gamma)}. \tag{31}$$

由 $C(x, t)$ 与 $C'(x, t)$ 之间的关系(30)式和初始条件(28)式,上式可以写为

$$\frac{\partial^\gamma C'(x,t)}{\partial t^\gamma} = D\frac{\partial^\alpha}{\partial x^\alpha} C'(x,t) + \delta(x)\frac{t^{-\gamma}}{\Gamma(1-\gamma)}. \tag{32}$$

将此方程对空间 x 作傅里叶变换,由函数及其分数阶导数和 δ 函数傅里叶变换的性质,可得

$$\frac{\partial^\gamma C'(k,t)}{\partial t^\gamma} = D(\mathrm{i}k)^\alpha C'(k,t) + \frac{t^{-\gamma}}{\Gamma(1-\gamma)}, \tag{33}$$

其中 $C'(k, t)$ 为浓度 $C'(x,t)$ 的傅里叶变换.解此方程可得[13]

$$C'(k,t) = E_\gamma[D(\mathrm{i}k)^\alpha t^\gamma]. \tag{34}$$

将上式中 k 换为 $-k$,可以表示为密度的特征函数形式,

$$C'(-k,t) = E_\gamma[D(-\mathrm{i}k)^\alpha t^\gamma], \tag{34a}$$

其中等号右边的函数为 Mittag-Leffler 函数[14],

$$E_\gamma(z) = \sum_{m=0}^{\infty}\frac{z^m}{\Gamma(m\gamma+1)}. \tag{35}$$

因此方程(29)柯西问题的格林函数解的特征函数为一 Mittag-Leffler 函数.这种解可以看作某一随机变量的分布密度函数,这种分布称为分数稳定分布,因为满足这种分布的变量可以看作是两个特征指数 α 和 γ 的稳定分布变量的商[15],当 $\gamma = 1$ 时,则为满足特征指数 α 的稳定分布.

对于解(34)式的傅里叶逆变换,不能以闭合形式给出其精确的解析解,但是 Mainardi 等人曾经通过 Mellin 变换得到了分数稳定分布密度函数的幂级数展开形式[16].为节省篇幅,在此不再给出,有兴趣的读者可参见文献[16].

方程(29)的格林函数解——分数稳定分布密度函数 $C'(x, t)$ 的一个基本特征可以写为标度形式[16,17]

$$C'(x,t) = t^{-\gamma/\alpha}K^\theta_{\alpha,\gamma}(x/t^{\gamma/\alpha}). \tag{36}$$

解的另一个基本特征是其分布密度函数的渐进行为表现为幂律形式的拖尾分布[18]:

$$C'(x,t) \propto t^\gamma/x^{\alpha+1}, \qquad x \to \infty, \tag{37}$$

在静止坐标系中,其位移 x 的α 阶中心矩为[18]

$$\langle | X(t) - vt |^\alpha\rangle = \int | x - vt |^\alpha p(x,t)\mathrm{d}x \propto t^\gamma, \quad x \to \infty, \tag{38}$$

其中 p 为浓度C 归一化后的概率密度.(38)式可以近似写为[18]

$$\langle | X(t) - vt |^2\rangle = \int | x - vt |^2 p(x,t)\mathrm{d}x \propto t^{2\gamma/\alpha}, \quad x \to \infty, \tag{38a}$$

亦即粒子扩散运动的位移的二阶中心矩是运移时间的非线性函数,其粒子的运动不再是布朗运动.

6.结论与讨论

本文的处理考虑了扩散过程的时间相关性和空间相关性,用非局域方法,得到了分数阶的对流-扩散方程,以此方程来描述反常扩散.由分数阶的对流-扩散方程,对传统的费克扩散定律进行推广,得到了广义的分数费克扩散定律,即流量与不同空间点的粒子浓度、浓度的变化历史与初始时刻的浓度有关.讨论了方程的解,说明了扩散运动的平均平方位移是运移时间的非线性函数.

[1] Metzler R and Klafter J 2000 *Phys*. *Rep*. **339** 1
[2] Metzler R, Glöckle W G and Nonnenmacher T F 1994 *Physica* A **211** 13
[3] Giona M and Roman H E 1992 *Physica* A **185** 87
[4] Giona M and Roman H E 1992 *J*. *Phys*. *Math*. *Gen*. **25** 2093
[5] Roman H E and Giona M J 1992 *Phys*. *Math*. *Gen*. **25** 2107
[6] Meeshaert M M, Benson D A and Baumer B 1998 *Phys*. *Rev*. E **59** 5026

[7] Benson D A, Wheatcraft S W and Meeshaert M M 2000 *Water Resour. Res.* **36** 1413
[8] Xin H W 1997 *Action Dynamics in Fractal Media* (Shanghai: Shanghai Scientific and Technological Education Press p36 (in Chinese) [辛厚文 1997 分形介质反应动力学(上海科学技术教育出版社)第 36 页]
[9] Samko S G, Kilbss A A and M&ichev O I 1993 *Fractional Integrals and Derivatives, Theory and Applications* (Amsterdam: Gordon and Breach)
[10] Gorenflo R, Mainardi F, Moretti D, Pagnini G and Paradisi P 2002 *Chem. Phys.* **284** 521
[11] Gorenflo R, Mainardi F, Moretti D, Pagnini G and Paradisi P 2002 *Physica* A **305** 106
[12] Meeshaert M M, Benson D A, Scheffler H P and Baumer B 2002 *Phys. Rev.* E **65** 41103
[13] Saichev A L and Zalavsky G M 1997 *Chaos* **7** 753
[14] Miller K S and Ross B 1993 *An Introduction to the Fractional Calculus and Fractional Differential Equations* (New York: Wiley)
[15] Kolokoltsov V, Korolev V and Uchaikin V 2001 *J. Math. Sci.* **105** 2569
[16] Mainardi F, Luchko Y and Pagnini G 2001 *Fract. Calcul. Appl. Anal.* **4** 153
[17] Scher H and Lax M 1973 *Phys. Rev.* B **7** 4491
[18] Zalavsky G M 1996 *Physica* D **110**

Anomalous diffusion and fractional advection-diffusion equation*

Chang Fu-Xuan Chen Jin Huang Wei
(*Yangtze River Scientific Research Institute, Changjiang Water Resources Commision, Wuhan* 430010, *China*)
(Received 7 January 2004; revised manuscript received 16 June 2004)

Abstract

Anomalous diffusion happens often in nature and society systems. In this paper, we develop a non-local method with temporal and spatial correlations to introduce a fractional order advection-diffusion equation based on the usually used local 2-nd order advection-dispersion equation. In this equation, the diffusion is a fractional order derivative of time and space. And then, we extend the classical Fick 's law for standard diffusion to a general fractional Fick 's law. The fractional Fick 's law shows that the current is related to the concentrations all over the space, also depends on the previous history and the initial condition. The solution of this fractional order advection-dispersion equation is fractional Lévy probability distribution density. And the mean square displacement is a nonlinear function of time.

Keywords: diffusion, fractional calculus, Lévy distribution, Fick 's law
PACC: 0560

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50339010), and the State Key Development Programl for Basic Research of China (Grant No. 2003CB415202).