

М а т е м а т и к а . П р и к л а д н а я м а т е м а т и к а

УДК 519.63

Мороз Любовь Игоревна

Амурский государственный университет

г. Благовещенск, Россия

E-mail: lubovep@mail.ru**Перепелкин Андрей Игоревич**

Амурский государственный университет

г. Благовещенск, Россия

E-mail: andrev_pepel@mail.ru**Мороз Евгений Михайлович**

Амурский государственный университет

г. Благовещенск, Россия

E-mail: frostamur@yandex.ru**Moroz Lyubov Igorevna**

Amur State University

Blagoveschensk, Russia

E-mail: lubovep@mail.ru**Perepelkin Andrey Igorevich**

Amur State University

Blagoveschensk, Russia

E-mail: andrev_pepel@mail.ru**Moroz Evgeny Mikhailovich**

Amur State University

Blagoveschensk, Russia

E-mail: frostamur@yandex.ru**АЛГОРИТМ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ФИШЕРА-ККП С ДРОБНОЙ
ПРОИЗВОДНОЙ ПО ВРЕМЕНИ И НЕСТАЦИОНАРНЫМ ЭФФЕКТОМ ОЛЛИ****AN ALGORITHM FOR THE NUMERICAL SOLUTION OF THE TIME-FRACTIONAL
FISHER-KPP EQUATION WITH NON-STATIONARY ALLEE EFFECT**

Аннотация. В работе рассмотрено дробное уравнение Фишера-ККП с нестационарным эффектом Олли, описывающее динамику популяции. Модель задана как начально-краевая задача для уравнения в частных производных с дробной производной по времени. Вычислительный алгоритм основан на сочетании неявной конечно-разностной схемы и итерационной процедуры. Моделирование выполняется с использованием ППП Matlab.

Abstract. A fractional Fisher-KPP equation with non-stationary Allee effect is considered describing the population dynamic. The model is specified as an initial boundary value problem for a time-

fractional partial differential equation. A computational scheme is based on a combination of an implicit finite difference method and an iterative procedure. Simulations are performed with the use of Matlab programming.

Ключевые слова: уравнение Фишера – Колмогорова – Петровского – Пискунова, дробная производная, неявная конечно-разностная схема, вычислительный эксперимент.

Key words: Fisher – Kolmogorov – Petrovsky – Piskunov equation, fractional derivative, implicit finite difference scheme, computational experiment.

DOI: 10.22250/20730268_2023_101_3

Введение

Уравнения в частных производных применяют при описании процессов различной природы. Особое место среди них занимает уравнение реакции-диффузии, одно из наиболее широко используемых в математическом моделировании. Оно представляет собой эволюционное уравнение, в котором пространственно-временные изменения функции обусловлены диффузией по пространственной переменной и нелинейным поведением по времени. Уравнения типа реакции-диффузии нашли применение в моделировании кинетики ферментативных реакций, динамики популяций, гетерогенного катализа, тепло- и массообмена, фазовых переходов и т.д. [1-5]. Известным примером уравнения реакции-диффузии является уравнение Фишера – Колмогорова – Петровского – Пискунова, или Фишера-КПП. Стандартное представление этого уравнения имеет вид:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + au - bu^2, \quad (1)$$

где D – коэффициент диффузии; параметр a характеризует скорость роста функции; b описывает квадратичные по плотности потери.

Уравнение (1) в совокупности с начальными и граничными условиями позволяет описать процессы самоорганизации и построения структурных формирований в неравновесных открытых системах – например, динамику популяций. Несмотря на то, что в уравнении Фишера-КПП задействованы основные механизмы популяционной динамики (диффузия, локальные квадратичные конкурентные потери), некоторые факторы – такие как неоднородность популяции по составу, мутации, влияние неоднородности среды и т.д. – остаются не учтенными [6].

Для повышения точности описания процессов моделями, основанными на уравнении Фишера-КПП, вводятся различные модификации и обобщения. В [7] приведен достаточно широкий обзор модификаций уравнения Фишера-КПП с учетом запаздывания: начиная с работ Бритона, в которых рассмотрено уравнение Фишера с запаздыванием в неограниченной области (идея случайных перемещений), и заканчивая подходом Смита-Таема, используемым при моделировании популяционной динамики, состоящей из особей одного вида, которые живут в среде с двумя пространственными участками (идея сведения к структурированной модели).

Для учета влияния нелокального взаимодействия на динамику популяций слагаемое bu^2 в уравнении (1) заменяют интегральным квадратичным членом [6, 8]. В [8] показано, что в случае нелокального конкурентного взаимодействия между особями возникают пространственные структуры со специфическими особенностями.

В некоторых случаях приспособленность небольших популяций бывает отрицательной, т.е. если плотность популяции слишком мала, то вид или группа особей не выживет. Чтобы учесть этот эффект, уравнение Фишера-ККП изменяется следующим образом:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u(1-u)(u-\rho), \quad (2)$$

где $u \in (0,1)$, $\rho \in (0,0.5)$

Параметр ρ соответствует так называемому порогу Олли, ниже которого скорость роста становится отрицательной [9]. Существование эффекта Олли (корреляция между размером или плотностью популяции и средней индивидуальной приспособленностью) является одним из важных факторов, влияющих на динамику переднего края роста популяции. Эффект Олли может быть связан с усилением вреда от биоагрессоров, повышенной смертностью из-за межвидовой конкуренции или снижением приспособленности. Известно, что эффект Олли влияет на скорость распространения популяции и изменяет генетический дрейф на краю этой популяции. В реальных ситуациях нет необходимости, чтобы порог Олли был постоянным. При изменении среды обитания или из-за внешних воздействий на условия окружающей среды сам порог Олли может зависеть от времени и, возможно, от пространства. Эффект Олли подробно описан в работах [9-11].

Обобщение уравнения Фишера-ККП на случай нецелых производных рассмотрено в [12-15]. Причина использования дробно-дифференциальных уравнений в биологии заключается в том, что они естественным образом связаны с эффектами памяти, которые характерны для большинства биологических систем. Тесно связаны они и с фракталами, которыми изобилуют биологические системы. Двумерная модель биологической популяции дробного порядка по времени описана в [12]. Уравнение Фишера-ККП с аномальной диффузией рассмотрено в [13]. Для описания бактериального чувства кворума предложена математическая модель, основанная на дробно-дифференциальном подходе, которая исследует самоподобные динамические процессы зарождения и роста бактерий [14]. Модель популяционной динамики, объединяющая в себе и дробно-дифференциальный подход, и эффект функционального запаздывания, представлена в работе [15].

В настоящей работе предложена модель популяционной динамики с учетом нестационарного эффекта Олли, основанная на дробно-дифференциальном подходе.

Так как построение аналитического решения для дифференциальных уравнений с дробной производной часто встречает серьезные затруднения, то во многих практических ситуациях оправдано применение численных методов, в частности метода конечных разностей.

Асимптотические решения нелокального одномерного уравнения Фишера-ККП с дробными производными в операторе диффузии построены в работе [16]. На основе метода конечных разностей и метода спектральной коллокации получено численное решение дробно-дифференциального обобщенного уравнения Фишера-ККП [17]. Модифицированный метод дробных рядов Тейлора был применен для получения приближенного решения уравнения Фишера-ККП с дробной производной по времени [18].

Целью данной работы является разработка вычислительного алгоритма для численного решения уравнения Фишера-ККП с дробной производной по времени и нестационарным эффектом Олли.

Математическая постановка задачи и вычислительная схема

Введем в рассмотрение постановку задачи моделирования популяционной динамики, используя дробно-дифференциальную модификацию уравнения (2) на заданной области. Ограничимся случаем, когда параметр ρ зависит только от времени.

$$\frac{\partial^\alpha u}{\partial t^\alpha} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u, t), \quad 0 < x < L, \quad 0 < t \leq T, \quad (3)$$

$$u|_{t=0} = u_0(x), \quad 0 \leq x \leq L, \quad (4)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=0} = \varphi(t), \quad \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=L} = \psi(t), \quad 0 \leq t \leq T, \quad (5)$$

где $u = u(x, t)$ – функция плотности популяции; $\frac{\partial^\alpha u}{\partial t^\alpha}$ – дробная производная по времени в смысле Капуто, $0 < \alpha < 1$; $f(u, t) = -\rho u + (1 + \rho)u^2 - u^3$ – функция роста популяции; $\rho = \rho(t)$ – порог Олли.

Левосторонняя производная Капуто для функции одной переменной $u(t)$ имеет вид [19]:

$$\frac{d^\alpha u(t)}{dt^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(n - \alpha)} \int_a^t u^{(n)}(\xi) d\xi, \quad (6)$$

где $n = [\alpha] + 1$, $\alpha > 0$, $[\alpha]$ – целая часть α ; $0 \leq \{\alpha\} < 1$ – дробная часть числа α .

Пусть задана пространственно-временная сетка $\Omega_h^c = \{x_i = ih, i = \overline{0, M}, t^j = t^0 + j\tau, j = \overline{0, N}\}$, покрывающая расчетную область, где h – шаг по координате, τ – шаг по времени.

Для построения неявной конечно-разностной схемы аппроксимируем производные, входящие в уравнение (3). Устойчивость и сходимость неявной схемы для линейного уравнения аномальной диффузии доказаны в работах [20, 21].

Воспользуемся аппроксимацией, предложенной [22], для определения производной дробного порядка от функции двух переменных:

$$\frac{\partial^\alpha u(x, t)}{\partial t^\alpha} \approx \frac{(\tau)^{-\alpha}}{\Gamma(2 - \alpha)} \sum_{k=0}^j \mu_k u_i^{j-k} + O(\tau^2), \quad (7)$$

где μ_k – весовые функции; $\Gamma(\cdot)$ – гамма-функция Эйлера.

Здесь:

$$\mu_0 = 1 - \zeta(\alpha - 1);$$

$$\mu_1 = -2 + 2^{1-\alpha} + 2\zeta(\alpha - 1);$$

$$\mu_2 = 1 - 2 \cdot 2^{1-\alpha} + 3^{1-\alpha} - \zeta(\alpha - 1);$$

$$\mu_k = (k - 1)^{1-\alpha} - 2 \cdot k^{1-\alpha} + (k + 1)^{1-\alpha}, \quad 3 \leq k \leq j - 1;$$

$$\mu_j = (j - 1)^{1-\alpha} - j^{1-\alpha},$$

где $\zeta(\cdot)$ – дзета-функция Римана.

Приближение второй производной запишем в виде стандартной симметричной конечно-разностной формулы второго порядка точности:

$$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} \approx \frac{u_{i-1}^j - 2u_i^j + u_{i+1}^j}{h^2} + O(h^2). \quad (8)$$

Подставляя формулы (7) и (8) в уравнение (3) и линеаризуя нелинейные слагаемые, получим схему:

$$\frac{(\tau)^{-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{k=0}^j \mu_k u_i^{j-k} = D \frac{u_{i-1}^j - 2u_i^j + u_{i+1}^j}{h^2} - \rho^j u_i^j + (1+\rho^j) u_i^j u_i^{j-1} - u_i^j (u_i^{j-1})^2. \quad (9)$$

Поскольку (3) является нелинейным уравнением в частных производных, то в процессе решения получим систему нелинейных разностных уравнений на каждом временном слое. Рационально использовать итерационную процедуру, которая позволит решить систему линейных алгебраических уравнений. Таким образом, формируется последовательность приближений $u_i^{(s)}$, сходящаяся к u_i^j для каждого момента времени τ^j , $j = \overline{0, N}$. Итерационный алгоритм на временном шаге j начинается с оценки начального значения поляризации с использованием значения из предыдущего временного шага, т.е. $(u_i^{(0)}) \approx u_i^{j-1}$. Комбинация схем конечных разностей с итерационной процедурой позволяет решать прикладные задачи без потери точности общей вычислительной схемы.

Система конечно-разностных уравнений (9), заданная для всех внутренних узлов сетки, дополняется начальным условием $u_i^0 = u_0$ при $i = \overline{0, M}$ и несимметричными конечно-разностными аппроксимациями для первых производных из граничных условий II рода при $j = \overline{0, N}$:

$$\frac{-3u_0^j + 4u_1^j - u_2^j}{2h} = \varphi(t) + O(h^2), \quad \frac{3u_M^j - 4u_{M-1}^j + u_{M-2}^j}{2h} = \psi(t) + O(h^2).$$

Численное исследование полученной схемы (9) для нелинейных дробно-дифференциальных уравнений реакции-диффузии приведено в [23].

Подбор функции $\rho(t)$ производится эмпирически. В работе [9] $\rho(t)$ предлагается взять равной $\sin(t)$ или $\frac{1}{4} + \frac{1}{t+1}$. В первом случае синусоидальную функцию можно связать с естественными сезонными колебаниями, а функцию гиперболы – с любыми внешними воздействиями на окружающую среду.

Вычислительный эксперимент

Результат реализации алгоритма продемонстрируем на начально-граничной задаче (3) – (5) при следующих значениях параметров: $0 \leq t \leq 15$, $0 \leq x \leq 15$, $\rho(t) = \sin(t)$, $D=1$,

$$u_0(x) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{x}{2\sqrt{2}} - \frac{1}{2}\right), \quad \varphi(t) = \frac{-1}{4\sqrt{2} \cosh^2\left(-\frac{1}{4}t - \frac{1}{2}\cos t\right)}, \quad \psi(t) = \frac{-1}{4\sqrt{2} \cosh^2\left(\frac{15}{2\sqrt{2}} - \frac{1}{4}t - \frac{1}{2}\cos t\right)}.$$

В случае целой производной для задачи (3)-(5) известно аналитическое решение

$$u_{\text{точн.}}(x,t) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{x}{2\sqrt{2}} - \frac{1}{4}t - \frac{1}{2}\cos(t)\right).$$

Графики функций $u(x,t)$, полученные численно по схеме (9) при $\alpha=0.99$, $t=15$ и $u_{\text{точн.}}$, приведе-

ны на рис. 1а. Значения функции плотности популяции $u(x,t)$ при $x = 7.5$ на всем временном отрезке при различных значениях порядка дробной производной α показаны на рис. 1б. Шаг по времени и по координате равен 0.05.

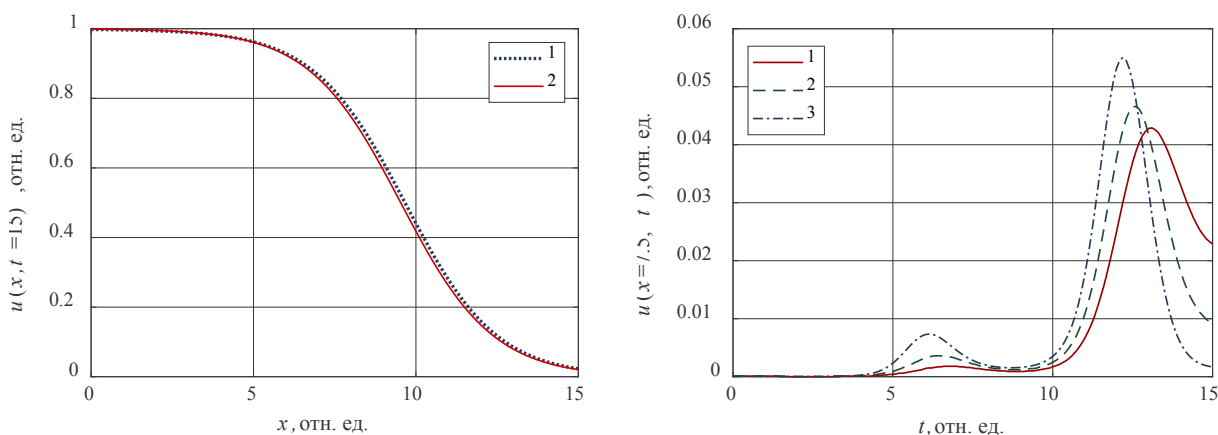


Рис. 1. Численное решение задачи (3)-(5), полученное с использованием неявной схемы (9) при $\alpha=0.99 - 1$, и аналитическое решение при $\alpha=1 - 2 - a$; профиль функции $u(x,t)$ по времени при $x=7.5$ для $\alpha=0.99 - 1$, $\alpha=0.8 - 2$, $\alpha=0.6 - 3 - б$.

Уменьшение порядка дробной производной по времени приводит к увеличению значений искомой функции при сохранении ее формы. Использование дробной производной по времени при моделировании процесса популяционной динамики потенциально позволяет управлять результатами расчетов за счет изменения порядка дробной производной α .

Заключение

Таким образом, в настоящей работе представлены результаты разработки вычислительных и программных средств для численного решения уравнения Фишера-ККП с дробной производной по времени и нестационарным эффектом Олли. Неявная конечно-разностная схема второго порядка точности сконструирована на основе определений Капуто. Результаты показывают, что применение аппарата дробного дифференцирования обеспечивает более «гибкий инструмент» благодаря варьированию порядка дробной производной. Это может быть использовано для обеспечения лучшего совпадения результатов моделирования с экспериментальными данными.

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

1. Grindrod, P. The theory and applications of reaction diffusion equations: patterns and waves // Oxford Applied Mathematics and Computing Series. – Oxford: Clarendon Press. – 1996. – P. 275.

2. Lam, K.-Y. Introduction to reaction-diffusion equations. theory and applications to spatial ecology and evolutionary biology / K.-Y. Lam, Y. Lou // Springer Cham. – 2022. – P. 312.

3. Шуай, И. Реакционно-диффузионная модель коммуникации бактерий с учетом вариации закона популяционного роста / И. Шуай, А.П. Хмельёв, А.Г. Масловская // Вестник АМГУ, серия «Естественные и экономические науки». – 2021. – Вып. 93. – С. 14–23.

4. Shuai, Y. Modeling of bacterial communication in the extended range of population dynamics / Y. Shuai, A.G. Maslovskaya, C. Kuttler // Mathematical Biology and bioinformatics. – 2023. – V. 18(1). – P. 89-104.

5. Maslovskaya, A.G. Theoretical and numerical analysis of the Landau – Khalatnikov model of ferroelectric hyste-

resis / A.G. Maslovskaya, L.I. Moroz, A.Yu. Chebotarev, A.E. Kovtanyuk // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation, – 2021. – V. 93. – P. 105524 (13).

6. Борисов, А.Ю. Численное моделирование популяционной 2D-динамики с нелокальным взаимодействием / А.В. Борисов, А.Ю. Трифионов, А.В. Шаповалова // Компьютерные исследования и моделирования. – 2010. – Т. 2. – С. 33-40.

7. Гурли, С.А. Нелокальные уравнения реакции-диффузии с запаздыванием: биологические модели и нелинейная динамика / С.А. Гурли, Дж. В.-Х. Соу, Дж. Х. Ву // СМФН. – 2003. – Т. 1. – С. 84–120.

8. Fuentes, M. A. Nonlocal interaction effects on pattern formation in population dynamics / M. A. Fuentes, M. N. Kuperman, V. M. Kenkre // Phys. Rev. Lett. – 2003. – V. 91. – P. 158104-1– 158104-4.

9. Alzaleq, L. Analysis of the Fisher-KPP equation with a time-dependent Allee effect / L. Alzaleq, V. Manoranjan // IOPSciNotes. – 2020. – V. 1. – P. 025003.

10. Roques, L. Allee effect promotes diversity in traveling waves of colonization / L. Roques, J. Garnier, F. Hamel, E.K. Klein // Proc. of the National Academy of Sciences. – 2012. – V. 109. – P. 8828–8833.

11. Courchamp, F. Allee effects in ecology and conservation / F. Courchamp, L. Berec, J. Gascoigne // Environ. Conserv. – 2008. – V. 36. – P. 80–85.

12. Srivastava, V. K. Two-dimensional time fractional-order biological population model and its analytical solution / V.K. Srivastava, S. Kumar, M.K. Awasthi, B. // Egyptian Journal of Basic and Applied Sciences. – 2014. – V. 1. – P. 71–76.

13. Stan, D. The Fisher-KPP Equation with Nonlinear Fractional Diffusion / D. Stan, J. L. Vázquez // Journal on Mathematical Analysis. – 2014. – V. 46. – P. 1–6.

14. Kuttler, C., Maslovskaya A. Hybrid stochastic fractional-based approach to modeling bacterial quorum sensing // Applied Mathematical Modelling. – 2021. – V. 93. – P. 360–375.

15. Горбова, Т.В. Численный алгоритм для модели популяционной динамики дробного порядка с запаздыванием // Изв. ИМИ УдГУ. – 2021. – Т.57. – С. 91–103.

16. Прозоров, А.А. Асимптотики и невязка одномерного нелокального уравнения Фишера – Колмогорова – Петровского – Пискунова с дробной производной // Физико-технические проблемы в науке, промышленности и медицине: сборник тезисов докладов VII Междунар. научно-практ. конф., г. Томск, 3-6 июня 2015 г. – Томск: Изд-во ТПУ. – 2015. – С. 121–122.

17. Youssef, M. Z. Solving fractional generalized Fisher – Kolmogorov – Petrovsky – Piskunov’s equation using compact-finite different methods together with spectral collocation algorithms / M. Z. Youssef, M. M. Khader, I. Al-Dayel, W. E. Ahmed // Hindawi Journal of Mathematics. – 2022. – V. 2022. – P. 1–9.

18. Khalouta, A. A new numerical technique for solving Caputo time-fractional biological population equation / A. Khalouta, A. Kadem // AIMS Mathematics. – 2019. – V. 4. – P.1307–1319.

19. Самко, С.Г. Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения / С.Г. Самко, А.А. Килбас, О.И. Маричев. – Минск: Наука и техника, 1987. – 688 с.

20. Петухов, А.А. Алгоритмы численного решения дробно-дифференциальных уравнений / А.А. Петухов, Д.Л. Ревизников // Вестник МАИ, – 2009. – Т. 16. – С. 228 – 234.

21. Meerschaert, M.M. Finite difference approximations for fractional advection–dispersion flow equations / M.M. Meerschaert, C. Tadjeran // Journal of Computational and Applied Mathematics. – 2004. – V. 172, №1. – P. 65 – 77.

22. Dimitrov, Y. Approximations for the Caputo Derivative (I) // Mathematics. – 2016. – P. 1–39.

23. Maslovskaya, A.G. Computational techniques for time-fractional modeling of thermal wave propagation in ferroelectrics / A. G. Maslovskaya, L. I. Moroz // Proceedings of the International Conference Days on Diffraction. – 2022. – P. 16.