



ХИМИКОТЕХНОЛОГИЧЕН И МЕТАЛУРГИЧЕН УНИВЕРСИТЕТ

ФАКУЛТЕТ ПО ХИМИЧНО И СИСТЕМНО ИНЖЕНЕРСТВО

КАТЕДРА „ИНЖЕНЕРНА ХИМИЯ ”

Професор д-р инж. Йордан Янков Христов

АВТОРЕФЕРАТ

на

ДИСЕРТАЦИЯ

на тема

**НЕЛИНЕЙНИ И АНОМАЛНИ ПРИЛОЖНИ ДИФУЗИОННИ
МОДЕЛИ: Приблизени решения, анализ, синтез и примери**

за придобиване на научна степен „доктор на науките”
по научна специалност **5.10. Химични технологии**

(Процеси и апарати в химичната и биохимичната технология)

София

2018

Поради съкратения вариант на текста в автореферата не винаги номерата на уравненията, фигурите и таблиците съвпадат с тези от дисертацията

**Защитата ще се състои
на 18.06.2018
от 10:00 ч
в зала „Асен Златаров” ,
сграда А на ХТМУ**

ВЪВЕДЕНИЕ

Проблеми разглеждани в дисертацията

Тази дисертация разглежда добре дефинирани класове от дифузионни модели широко използвани в инженерната практика. Едномерните модели на нелинейна или аномална дифузия са свързани преди всичко с проблеми на нестационарна топлопроводност с използване на локални (от цял порядък) производни, а също така и на субдифузионни и супердифузионни проблеми използващи нелокални по време и пространство производни със сингулярна памет. Специално внимание е обърнато на дифузионни модели моделирани с наскоро предложения интегрален оператор на Caputo-Fabrizio използващ експоненциална несингулярна памет. Най-накрая, но не на последно място по внимание, специално са разгледани конкретни примери, където разработените технологии на решения се прилагат директно.

Основната цел на проведените изследвания е развитието на приближени аналитични решения в затворена форма, с директна приложимост в инженерната практика, и позволяващи да се установят явни зависимости между основните параметри контролиращи моделираните дифузионни процеси.

Независимо от математическия подход използван при решаването на всички задачи и анализа на получените решения от физична гледна точка те винаги са сравнявани със съществуващи решения или експериментални данни публикувани в литературата.

С цел ясно да се дефинира как разглежданите в дисертацията проблеми са свързани с Химичното Инженерство (или Инженерната Химия, с друг поглед), ние трябва да си припомним, че в тази всеобхватна инженерна област, където аз работя вече 39 години, съществуват няколко основни направления, а именно:

- **Единични Операции (Unit Operations)** свързани с основните стъпки в химичните технологии и процесите на разделяне, които също са твърде близки до проблемите на интензифицирането на процесите (**Process intensification**).
- **Системно инженерство (Process System Engineering)** е направление занимаващо се с комплексни химични инсталации и техния контрол, казано в най-общ смисъл.

- **Преносни Процеси (Transport Phenomena)** е областта даваща фундаментално знание за процесите свързани с всички елементарни операции и преди всичко с механизмите на пренос на импулс (количество движение), маса и енергия, и какво е тяхното взаимодействие.
- **Математическо Моделиране (Mathematical Modelling)** е областта, в която основните въпроси могат да са по отношение както на единични процеси или операции, така и към сложни системи и мащабен преход. Тази област е директно свързана с направлението разглеждащо **Процесите на Пренос**.

Тази дисертация разглежда **Математически модели на Преносни Процеси** свързани с нелинейна и аномална дифузия (със или без ефекти на памет).

Основният подход за получаване на приближените аналитични решения е методът на интегралния баланс в различни модификации, които са обяснени детайлно във всяка глава. Това включва приближени аналитични решения на нелинейни дифузионни уравнения с локални (**Част 1**) и нелокални (със сингулярна памет) памет (**Част 2**).

Освен това усилията са насочени към синтез (получаване, извеждане) и анализ на модели с несингулярна памет изхождайки от добре дефинирани конститутивни уравнения (**Част 3**).

Показани са решени примери на практически проблеми с прилагане на интегрален метод (**Част 1 и Част 4**)

ОБЛАСТ НА ИЗСЛЕДВАНИЯТА, ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ

Формулирането на целите и задачите при оформяне на дисертации е по-скоро формална стъпка, защото при добро и подробно анализиране на всеки решен в нея проблем ясно се вижда какво точно е новото и ясно може да се оцени приноса на всяко отделно изследване, което е съставна част на дисертацията.

За разлика от обикновените докторски дисертации, където зоната на изследване на проблемите е силно стеснена и крайната цел е да покаже възможностите на дисертанта за бъдеща научна дейност, то при дисертации от настоящия тип (за доктор на науките) основната задача е да се покаже приноса към развитието на определена област, с прилагане на нови методи и получаване на широк кръг нови резултати, оформящи определено направление в науката.

Както беше формулирано в предговора на дисертацията, проблемите разглеждани в нея са в областта на модели на дифузионни процеси с нелинейно и аномално поведение, със или без памет. Така дефинирания проблем трябва да бъде прецизиран от гледна точка на използваните подходи за решаване и анализ на разглежданите модели.

Мотивация на изследванията

Преди всичко, основната идея за развитието на приближените аналитични решения развити в тази дисертация идва от две основни изследвания на автора върху приложението на интегралния метод (в най-простата му форма позната като топлинен интегрален баланс на Гудман) към нестационарни процеси с дифузионни уравнения: Hristov (2009) и Hristov (2010,2011).

- **Hristov J.** The heat-balance integral method by a parabolic profile with unspecified exponent: *Analysis and Benchmark Exercises, Thermal Science, 13 (2) (2009) 27-48.*
- **Hristov, J.** Heat-Balance Integral to Fractional (Half-Time) Heat Diffusion Sub-Model, *Thermal Science, 14 (2) (2010) 291-316.*
- **Hristov J.,** Approximate Solutions to Fractional Subdiffusion Equations: The heat-balance integral method, *The European Physical Journal-Special Topics, v. 193 (2011) 229-243.*

Тези начални изследвания бяха проведени с линейни модели, но показаха потенциала на интегралния метод за получаване на явни приближени аналитични решения за класове модели, където той не е бил използван до този момент.

Тези начални резултати послужиха като отправна точка за по-нататъшно развитие на приложенията на метода, а по-точно към нелинейни дифузионни модели, там, където интегралния подход не е прилаган до публикуването на изследванията представени в тази дисертация. Още повече, резултатите получени с решението с нелинейните дифузионни модели с локални производни и началния успех с решенията с нелокални производни (Hristov, 2010,2011) послужиха като мотивация за прилагане на интегралния метод към дифузионни модели с памет моделирана с нелокални по време (и пространство) производни със сингулярни ядра.

Цели на изследванията

Така общо формулираните идеи бяха реализирани в серия от изследвания, които могат да бъдат групирани в две основни направления (като цели за изследвания):

А) Приближени интегрални решения на нелинейни и аномални дифузионни модели

В) Синтез (получаване, излежаване, формулиране) на модели с нелокални производни директно свързвани с практически важни инженерни проблеми

А) Приближени интегрални решения

В направление А бяха формулирани две основни подобласти на изследвания

[A1] Получаване на приближени интегрални решения на нелинейни дифузионни модели, преди всичко случаи на нелинейно топлопроводност, с коефициенти на дифузия зависещи от температурата (концентрацията).

[A2] Получаване на приближени интегрални решения на дифузионни модели с дробни по време и пространство производни със сингулярни ядра.

Развитието, т.е. получаването на тези приближени решения изискват подобряване на техниките на интегралния метод с цел адекватно да се отговори на възникващите проблеми при неговото прилагане в тези две нови области (към тези класове от дифузионни модели). В резултат на това бяха формулирани още две основни задачи, а именно:

[A3] Подобряване на техниките на интегриране така, че те да работят както с локални така и нелокални по време производни, отчитайки особеностите на класическия метод на Гудман, където се използва правилото на Лайбниц за диференциране под знака на интеграла, неприложимо при нелокални производни.

[A4] Прилагане на интегралния метод към дифузионни уравнения с локални и нелокални по време производни, когато дифузионния член на уравнението е от висок ред.

Всички резултати от тези изследвания са демонстрирани чрез решения на известни нелинейни дифузионни модели, като конкретни задачи, техния анализ и сравнение с известни от литературата. Тези изследвания са организирани основно в **Част 1** и **Част 2**, а примерите са представени в **Част 4**. По-подробно описание на изследванията и решението проблеми и направено в **Организация на дисертацията**

Всички тези изследвания от направление **A**, формулирани като **[A1]- [A4]** разглеждат приближени аналитични решения и техния анализ, и оформят първото основно направление в дисертацията.

В) Синтез (получаване, извеждане, формулиране) на модели с нелокални производни директно свързвани с практически важни инженерни проблеми.

В това направление бяха формулирани две подобласти

[B1] Нов извод на известното уравнение на Ward-Tordai и формулиране на универсално дробно-диференциално уравнение за повърхностна адсорбция на сърфактанти под дифузионен контрол. Това изследване е представено в Глава 2.8

[B2] Анализи и синтез на модели с несингулярна памет

Това е нова област възникнала през 2015 година и последвана от голям поток публикации с нови резултати и противоречия. Основният интерес, който възникна и целите на изследванията в **[B2]**, след това обобщени в **Част 3**, могат да формулират като

[B2-1] Анализ на съществуващите конструкции на интегрални оператори с несингулярна памет и физическата основа за тяхното използване.

[B2-2] Извод на модели на нестационарна дифузия на базата на конститутивни уравнения използващи постановката на Cattaneo, при които дробни по време и пространство интегрални оператори се формулират по естествен път.

Тези изследвания бяха предизвикани и мотивирани от големия брой публикации използващи подхода на формална фракционализация (Виж **Глава 3.1**) и водещи до физически неадекватни резултати.

[B2-3] Критично изследване на дифузионни модели конструирани чрез прилагане на подхода на формална фракционализация.

[B2-4] Реални примери на дифузионни процеси с релаксация, които естествено водят до формулиране на интегрални оператори с експоненциални несингулярни ядра.

СТРУКТУРА И ОРГАНИЗАЦИЯ НА ДИСЕРТАЦИЯТА

Тъй като тази колекция от научни резултати, представени под формата на дисертация, всъщност не е книга, независимо че е организирана като монография, то за яснота на изложението в нея са включени две допълнителни части. **Част А** и **Част В**, а по-точно

- **Част А.** В тази част е дадена минимална информация необходима за четене на основните глави на дисертацията. Представени са накратко проблемите на нелинейната и аномална дифузия. Освен това са разгледани основни дефиниции на класическото дробно-диференциално смятане, релаксационни ядра, принципът на изчезваща памет и примери свързани с реологични проблеми довели до широкото използване на дробните модели.
- **Част В.** Тази част е организирана на края на дисертацията и разглежда в кондензиран вид основните резултати от изследванията и свързаните с тях научни приноси.

Тъй като главите представящи научните резултати са самостоятелни текстове, те са организирани по групи (в части) според типа на диференциалните оператори използвани за моделиране на дифузионните процеси, а именно:

- **ЧАСТ 1** е посветена на приближени решения на задачи свързани с нестационарна нелинейна топлопроводност с коефициенти на топлинна дифузия зависещи от температурата (**Глави 1.1, 1.2, 1.3 и 1.4**). **Глава 1.5** разглежда един алтернативен подход за прилагане на метода на интегралния баланс с помощта на дробни по време производни от порядък $1/2$. **Глава 1.6** представя един нов подход за разрешаване на дифузионни проблеми от висок ред чрез **Метод с Многократно Интегриране (Multiple Integral balance Method)**, демонстриран чрез решение на линейното уравнение на Mullins, свързано с механизма на повърхностна дифузия. **Глава 1.7** е първият опит да се реши приближено, чрез интегрален метод, пълното уравнение на Mullins за термично набраздяване, свързано с механизма на изпарение-кондензация. **Глава 1.8** е кратък преглед на използваните (във всички изследвания) нелинейни трансформации на дифузионните членове на моделите, които позволяват прилагане на различните техники на интегралния метод и апроксимиращия профил с недефинирана експонента.
- **ЧАСТ 2** представя основния подход позволяващ използването на метода на интегралния баланс към дифузионни модели със сингулярни памети (weakly singular kernels), включени в

структурите на дробни интегрални и производни. **Глава 2.1** демонстрира възможностите на интегралния метод чрез прости примери. Приближените решения чрез метода с двойно интегриране на линейното субдифузионно уравнение (**Глава 2.2**) и нелинейното субдифузионно уравнение (със степен дифузионен коефициент зависещ от концентрацията) (**Глава 2.3**) са, всъщност, първите опити да се използва този подход при модели с дробни по време производни на Riemann-Liouville и Caputo. Успешно решение на субдифузионен модел с коефициент на дифузия зависещ от времето е представено в **Глава 1.4**. Интегрални решения на дифузионни модели с дробни по пространство производни са получени в случаи на постоянен дифузионен коефициент (**Глава 1.5**), степен дифузионен коефициент (по пространствената координата) (**Глава 1.6**), и дифузия с потенциално-степенен дифузионен коефициент (**Глава 1.7**).

Последната **Глава 1.8** на **Част 2** представя един нов извод на уравнението на *Ward-Tordai* за повърхностна адсорбция на сърфактанти, изцяло с техниките на дробно диференциално смятане. Този подход позволява формулиране на унифицирано дробно-диференциално уравнение от порядък $1/2$, моделиращо повърхностна адсорбция на сърфактанти при наличие на дифузионен контрол.

- **ЧАСТ 3** е изцяло посветена на дифузионни модели представени чрез дробния оператор на Caputo-Fabrizio използващ експоненциална несингулярна памет **Глава 3.1**. Направен е преглед на дефинициите на интегрални оператори (производни), започвайки от базовата дефиниция на Caputo-Fabrizio, с несингулярна памет и техните свойства (**Глава 3.1**). **Глава 3.2** представя извод на уравнение на нестационарна топлопроводност, използващ постановка на Cattaneo и ядро на Jeffrey, при което интегралния оператор на Caputo-Fabrizio (производна по време) възниква естествено като демпфиращ член на дифузионния модел. **Глава 3.3** формулира модел с пространствена памет, за разлика от класическия подход с временна памет, като по този начин се дефинира пространствен интегрален оператор (производна) с експоненциално ядро, от тип Caputo, и е решена задачата за стационарна дифузия на топлинна. **Глава 3.4** разглежда извод на дробно-диференциална версия на уравнението на Додсън, чрез конститутивен подход и уравнение свързващо потока и градиента чрез интеграл с експоненциална памет, за разлика от изходната, *ad hoc*, формулировка на този модел. Важен резултат на това изследване е дефинирането на функционалната връзка между дробния параметър и дифузионното число на Deborah.

Глава 3.5 разглежда, от критична гледна точка, проблема с формалната фракционализация на дифузионното уравнение, когато производната по време в класическия модел на Фурие (Фик) се замени формално с производната (по време) на Caputo-Fabrizio.

Глава 3.6 представя анализ на основния проблем: какъв тип памет се моделира чрез експоненциалното ядро използвано в оператора на Caputo-Fabrizio и как новите производни (оператори) кореспондират с реални физични процеси, използвайки за база поведението на разтеглената експоненциална функция на Kohlrausch.

Глава 3.7 разглежда няколко примера, публикувани в литературата, където експоненциалната релаксационна функция е получена експериментално или в резултат на развитие на модел, даващи възможност за използване на интегралния оператор (производна) на Caputo-Fabrizio.

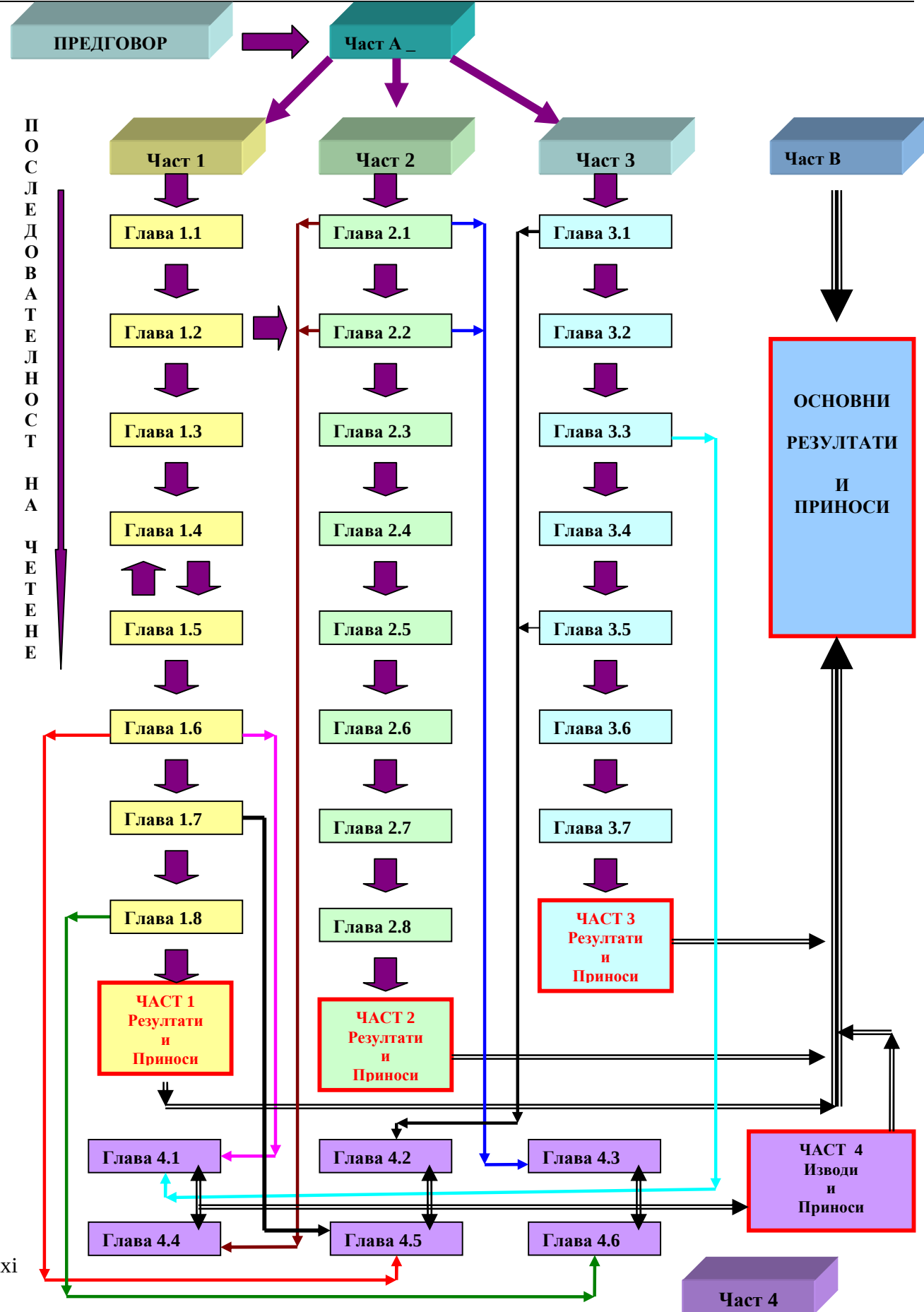
- **ЧАСТ 4** е колекция на решения на някои практически важни дифузионни задачи, където техниките развити в предхождащите части (глави) се прилагат успешно.

За по-добро и удобно четене на тази колекция от резултати (дисертация) е представена схема позволяваща лесно да се установят връзките между отделните глави и решените примери в **Част 4**.

Независимо от начертаната схема могат да бъдат препоръчани някои улесняващи четенето подходи, а именно:

- **ЧАСТ 1.** Читателят не се нуждае от повече знание от това предоставяне от университетския курс по математика.
- **ЧАСТ 2.** Необходими са знания за класическото дробно-диференциално смятане. Ако читателят не е запознат с тази материя, то тогава е по-добре предварително да се прочете съответната глава в **Част А**.
- **ЧАСТ 3.** Изследванията представени тук изискват познания в областта на термодинамиката и моделиране на релаксационни процеси чрез принципа на изчезващата памет. Без опит в тези две области, за яснота при четенето на главите включени в **Част 3**, е добре предварително да прочетат съответните глави на **Част А**, посветени на принципа на изчезващата памет и функцията на влияние (the function of influence or fading memory kernel).
- **ЧАСТ 4.** Необходимото знание за успешно четене на представените резултати зависи от разглеждания проблем, а по-точно тези от предхождащите глави, свързани както с типа на дифузионно уравнение, така и с използваната интегрална техника на решение.

Този автореферат представя накратко съдържанието на Част 1 - Част 4.



ПУБЛИКАЦИИ ПО ДИСЕРТАЦИЯТА

Глави от книги

1. **(A1) Hristov J.**, Approximate solutions to time-fractional models by integral balance approach, Chapter 5, In: *Fractional Dynamics*, C. Cattani, H.M. Srivastava, Xia-Jun Yang, (eds), De Gruyter Open, 2015, pp.78-109.
2. **(A2) Hristov J.**, Integral-balance solution to nonlinear subdiffusion equation, Chapter 3, in *Frontiers in Fractional Calculus, 2017*, S. Bhalekar, Ed., Bentham Science Publishers, 2017, pp.71-106.
3. **(A3) Hristov J.** Fractional derivative with non-singular kernels: From the Caputo-Fabrizio definition and beyond: Appraising analysis with emphasis on diffusion models, Chapter 10, in *Frontiers in Fractional Calculus, 2017*, S. Bhalekar, Ed., Bentham Science Publishers, 2017, pp.270-342.
4. **(A4) Hristov J.**, Integral-balance approach to 1-D space-fractional model, in: *Mathematical Methods in Engineering - Applications in Dynamics of Complex Systems*, edited by Kenan Taş, Dumitru Baleanu and J.A.T. Machado, and will be published by Springer in 2018.
5. **(A5) Hristov J.**, A transient flow of a non-Newtonian fluid modelled by a mixed time-space derivative: An improved integral-balance approach, in: *Mathematical Methods in Engineering - Theory*, edited by Kenan Taş, Dumitru Baleanu and J.A.T. Machado, and will be published by Springer in 2018.
6. **(A6) Hristov J.**, On the integral-balance solvability of the nonlinear Mullins model, Applied Mathematics and Computing, ICMC 2018, Varanasi, India”, *Springer Proceedings in Mathematics & Statistics* In Press

Статии в списания с импакт фактор (Thomson Reuters)

7. **(B1) Hristov J.**, An Approximate Analytical (Integral-Balance) Solution to A Nonlinear Heat Diffusion Equation, *Thermal Science*, 19(2) (2015), pp. 723-733; DOI: 10.2298/TSCI140326074H
8. **(B2) Hristov J.**, Diffusion Models with Weakly Singular Kernels in the Fading Memories: How the Integral-Balance Method can be Applied?, *Thermal Science*, 19(3) (2015), pp. 947-957; DOI: 10.2298/TSCI130803151H
9. **(B3) Hristov J.**, Integral solutions to transient nonlinear heat (mass) diffusion with a power-law diffusivity: a semi-infinite medium with fixed boundary conditions, *Heat Mass Transfer*, 52 (3) (2016), pp.635-655, DOI: 10.1007/s00231-015-1579-2.
10. **(B4) Hristov J.**, Double Integral-Balance Method to the Fractional Subdiffusion Equation: Approximate solutions, optimization problems to be resolved and numerical simulations, *J. Vibration and Control* (SAGE), 23(2017),7,pp. 2795-2818; DOI: 10.1177/1077546315622773 ; Impact Factor (2015):1.643
11. **(B5) Hristov J.**, An Alternative Integral-Balance Solution to Transient Diffusion of Heat (Mass) by time-Fractional Semiderivatives and Semiintegrals: Fixed boundary conditions, *Thermal Science*, 20 (2016),6, pp. 1867-1878; DOI:10.2298/TSCI150917010H;
12. **(B6) Hristov J.**, Transient Heat Diffusion with a Non-Singular Fading Memory: From the Cattaneo Constitutive Equation with Jeffrey’s kernel to the Caputo-Fabrizio time-fractional derivative, *Thermal Science*, 20 (2) (2016), pp.765-770.; DOI:10.2298/TSCI160112019H
13. **(B7) Hristov J.**, Steady-State Heat Conduction in A Medium with Spatial Non-Singular Fading Memory: Derivation of Caputo-Fabrizio space-fractional derivative with Jeffrey’s kernel and analytical solutionsp *Thermal Science*, 2017, Vol. 21, No. 2, pp. 827-839
14. **(B8) Hristov J.**, An approximate solution to the transient space-fractional diffusion equation: Integral-balance

- approach, optimization problems and analyzes, *Thermal Science*, 21 (2017), 1A, pp. 309-321;
DOI: DOI:10.2298/TSCI160113075H;
15. (B9) Antoine Fabre, **Jordan Hristov**, On the integral-balance approach to the transient heat conduction with linearly temperature-dependent thermal diffusivity, *Heat Mass Transfer*, January 2017, Volume 53, Issue 1, pp 177–204 ;
DOI: 10.1007/s00231-016-1806-5
 16. (B10) **Hristov J.**, Transient space-fractional diffusion with a power-law superdiffusivity: Approximate integral-balance approach, *Fundamenta Informaticae (IOS Press)* , 151 (2017) , 1-4, pp. 371–388 ; DOI 10.3233/FI-2017-1498.
 17. (B11) **Fabre, A. Hristov, J.; Bennacer, R.**, Transient heat conduction in materials with linear power-law temperature-dependent thermal conductivity: Integral-Balance Approach, *Fluid Dynamics & Materials Processing*, Vol.12, No.1, pp.69-85, 2016; DOI: [10.3970/fdmp.2016.012.069](https://doi.org/10.3970/fdmp.2016.012.069) ; SJR= 0.571; (Emerging Sources Citation Index ; SCOPUS ; Thomson Reuters Master Journal List ; Web of Science Core Collection)
 18. (B12). **Hristov J.**, Subdiffusion model with time-dependent diffusion coefficient: Integral-balance solution and analysis, *Thermal Science*, 21 (2017), 1A, pp.69-80, DOI: 10.2298/TSCI160427247H
 19. (B13) **Hristov J.**, MULTIPLE INTEGRAL-BALANCE METHOD: Basic idea and an example with Mullins model of thermal grooving, *Thermal Science*, 21 (2017), pp.1555-1560. DOI: 10.2298/TSCI170410124H
 20. (B14) **Hristov J.**, THE RADIATION DIFFUSION EQUATION: Approximate explicit analytical solutions by improved integral-balance method, *Thermal Science*, 22 (2018) in press, DOI: 10.2298/TSCI171011308H.
 21. (B15) **Hristov J.**, Fourth-order fractional diffusion model of thermal grooving: Integral approach to approximate closed form solution of the Mullins model, *Math. Model. nature. Phenomena*, 12 (2017), 6, pp.xxx-xxx , in press.
 - 22*. (B16) **Hristov J.**, A new closed-form approximate solution to diffusion with quadratic Fujita's non-linearity: The case of diffusion controlled sorption kinetics relevant to rectangular adsorption isotherms, *Heat Mass Transfer*, Submitted, July, 2017- under review

Статии в списания с SJR (SCOPUS)

23. (C1) **Hristov J.**, A unified nonlinear fractional equation of the diffusion-controlled surfactant adsorption: Reappraisal and new Solution of the Ward-Tordai Problem, *Journal of King Saud University - Science*, Volume 28, Issue 1, January 2016, Pages 7–13 ; DOI: 10.1016/j.jksus.2015.03.008.

Статии в международни реферирани списания

24. (D1) **Hristov J.**, Space-fractional diffusion with a potential power-law coefficient: Transient approximate solution, *Progr. Fract. Differ. Appl.* 3, No. 1, 19-39 (2017); DOI: 10.18576/pfda/030103
25. (D2) **Hristov J.**, Derivation of fractional Dodson's equation and beyond: Transient mass diffusion with a non-singular memory and exponentially fading-out diffusivity, *Progr. Fract. Differ. Appl.* (2017) vol.3, N04, 255-270;
DOI: 10.18576/pfda/030402
26. (D3) **Hristov J.**, The non-linear Dodson diffusion equation: Approximate solutions and beyond with formalistic fractionalization, *Mathematics in Natural Sciences*, 1(1) (2017), pp.1-17;
<http://dx.doi.org/10.22436/mns.01.01.01>
27. (D4) **Hristov J.**, Emerging issues in the Stokes' first problem for a Casson fluid: from integer to fractional models by integral-balance approach, *Journal of Computational Complexity and Applications*, 3 (2) (2017) 72-86.

Автореферат

НЕЛИНЕЙНИ И АНОМАЛНИ ПРИЛОЖНИ ДИФУЗИОННИ МОДЕЛИ:

Приблизени решения, анализ, синтез и примери

СЪДЪРЖАНИЕ

Част 1

НЕЛИНЕЙНИ ДИФУЗИОННИ МОДЕЛИ С ПРОИЗВОДНИ ОТ ЦЯЛ ПОРЯДЪК

ПРЕДГОВОР.....	1
.....	
1.1. ПРИБЛИЖЕНО АНАЛИТИЧНО РЕШЕНИЕ НА НЕЛИНЕЕН ДИФУЗИОНЕН МОДЕЛ НА ТОПЛИННА ДИФУЗИЯ: Интегрален подход	3
1.2. ИНТЕГРАЛНО РЕШЕНИЕ НА НЕСТАЦИОНАРНА ДИФУЗИЯ НА ТОПЛИНА) СЪС СТЕПЕНЕН, ЗАВИСЕЩ ОТ ТЕМПЕРАТУРАТА (КОНЦЕНТРАЦИЯТА), ДИФУЗИОНЕН КОЕФИЦИЕНТ	13
1.3. НЕСТАЦИОНАРНА ТОПЛОПРОВОДНОСТ С КОЕФИЦИЕНТ НА ТОПЛИННА ДИФУЗИЯ ЛИНЕЙНО ЗАВИСЕЩ ОТ ТЕМПЕРАТУРАТА: Интегрален метод	33
1.4. НЕСТАЦИОНАРНА ТОПЛОПРОВОДНОСТ С КОЕФИЦИЕНТ НА ТОПЛИННА ДИФУЗИЯ С ПОТЕНЦИАЛНО СТЕПЕННА ЗАВИСИМОСТ ОТ ТЕМПЕРАТУРАТА:	47
Кратко представяне на решение чрез интегрален метод	
1.5. АЛТЕРНАТИВНО ИНТЕГРАЛНО РЕШЕНИЕ НА НЕСТАЦИОНАРНА ДИФУЗИЯ ЧРЕЗ ДРОБНИ ПРОИЗВОДНИ И ИНТЕГРАЛИ ОТ ПОРЯДЪК $1/2$	53
1.6. МЕТОД НА ИНТЕГРАЛНИЯ БАЛАНС С МНОГОКРАТНО ИНТЕГРИРАНЕ: Основна идея и пример с уравнението на Mullins	65
1.7. ИНТЕГРАЛЕН ПОДХОД КЪМ НЕЛИНЕЙНИЯ МОДЕЛ НА MULLINS	71
1.8. НЕЛИНЕЙНА ТРАНСФОРМАЦИЯ НА ДИФУЗИОННИЯ ЧЛЕН И АПРОКСИМАЦИЯ НА ПРИБЛИЖЕНИЯ ПРОФИЛ	81
Част 1: ОСНОВНИ РЕЗУЛТАТИ И ПРИНОСИ	89

Част 2

АНОМАЛНИ И НЕЛИНЕЙНИ ДИФУЗИОННИ МОДЕЛИ С ПРОИЗВОДНИ ОТ ДРОБЕН ПОРЯДЪК СЪС СИНГУЛЯРНА ПАМЕТ

ПРЕДГОВОР	93
2.1. ДИФУЗИОННИ МОДЕЛИ СЪС СЛАБИ СИНГУЛЯРНИ ЯДРА В ИЗЧЕЗВАЩАТА	95

Автореферат

НЕЛИНЕЙНИ И АНОМАЛНИ ПРИЛОЖНИ ДИФУЗИОННИ МОДЕЛИ:

Приближени решения, анализ, синтез и примери

ПАМЕТ: Как може да се използва метода на интегрален баланс?

2.2.	ЛИНЕЕН СУБДИФУЗИОНЕН МОДЕЛ: Метод с двойно интегриране, приближени решения и свързани проблеми	103
2.3.	НЕЛИНЕЕН СУБДИФУЗИОНЕН МОДЕЛ: Метод с двойно интегриране, приближени решения и свързани проблеми	115
2.4.	СУБДИФУЗИОНЕН МОДЕЛ С КОЕФИЦИЕНТ ЗАВИСЕЩ ОТ ВРЕМЕТО	131
2.5.	НЕСТАЦИОНАРНА СУПЕРДИФУЗИЯ С ПОСТОЯНЕН ДИФУЗИОНЕН КОЕФИЦИЕНТ	141
2.6.	НЕСТАЦИОНАРНА СУПЕРДИФУЗИЯ СЪС СТЕПЕНЕН ДИФУЗИОНЕН КОЕФИЦИЕНТ	151
2.7.	НЕСТАЦИОНАРНА СУПЕРДИФУЗИЯ С ПОТЕНЦИАЛНО-СТЕПЕНЕН ДИФУЗИОНЕН КОЕФИЦИЕНТ	163
2.8.	УНИФИЦИРАНО НЕЛИНЕЙНО ДРОБНО ДИФЕРЕНЦИАЛНО УРАВНЕНИЕ ЗА ДИФУЗИОННО КОНТРОЛИРАНА АДСОРБЦИЯ НА ПОВЪРХНОСТНО АКТИВНИ ВЕЩЕСТВА: Преоценка и ново решение на проблема на Ward-Tordai	177
ЧАСТ 2: Основни резултати и приноси		181

Част 3

НЕЛИНЕЙНИ ДИФУЗИОННИ МОДЕЛИ С ПРОИЗВОДНИ ОТ ДРОБЕН ПОРЯДЪК С НЕСИНГУЛЯРНА ПАМЕТ

ПРЕДГОВОР		185
3.1.	ДРОБНИ ОПЕРАТОРИ (ПРОИЗВОДНИ) С НЕСИНГУЛЯРНИ ЯДРА: Състояние на проблема	187
3.2.	НЕСТАЦИОНАРНА ДИФУЗИЯ С НЕСИНГУЛЯРНА ИЗЧЕЗВАЩА ПАМЕТ: От уравнение на Катанео с ядро на Джефри до дробна (по време) производна на Капуто-Фабрицио	189
3.3.	СТАЦИОНАРНА ТОПЛОПРОВОДНОСТ В СРЕДА С ПРОСТРАНСТВЕНА НЕСИНГУЛЯРНА ИЗЧЕЗВАЩА ПАМЕТ: Извод на пространствена производна на Капуто-Фабрицио с ядро на Джефри и аналитични решения	193
3.4.	ДРОБНО ДИФУЗИОННО УРАВНЕНИЕ НА ДОДСЪН: Извод и анализ	203
3.5.	ФОРМАЛНА ФРАКЦИОНАЛИЗАЦИЯ НА ДИФУЗИОННОТО УРАВНЕНИЕ	211

Автореферат

НЕЛИНЕЙНИ И АНОМАЛНИ ПРИЛОЖНИ ДИФУЗИОННИ МОДЕЛИ:

Приближени решения, анализ, синтез и примери

3.6. КАКВИ РЕЛАКСАЦИОННИ ПРОЦЕСИ СЕ МОДЕЛИРАТ С НЕСИНГУЛЯРНА ЕКСПОНЕНЦИАЛНА ПАМЕТ И НОВИТЕ ДРОБНИ ОПЕРАТОРИ (ПРОИЗВОДНИ)?	215
ЧАСТ 3: ОСНОВНИ РЕЗУЛТАТИ И ПРИНОСИ	221
Част 4	
НЯКОИ ПРИЛОЖЕНИЯ: ПРИМЕРИ	223
ПРЕДГОВОР	xx 225
4.1. ДИФУЗИОННО УРАВНЕНИЕ НА ДОДСЪН: Приближени решения и експерименти с формална фракционализация	227
4.2. ВЪЗНИКВАЩИ ПРОБЛЕМИ ПРИ МОДЕЛИРАНЕТО НА ПЪРВА ЗАДАЧА НА СТОКС ЗА ФЛУИД НА CASSON: Изследване на модели с цял и дробен порядък чрез интегрален метод	233
4.3. ПЪРВА ЗАДАЧА НА СТОКС ЗА НЕНЮТОНОВ ФЛУИД МОДЕЛИРАН СЪС СМЕСЕНИ ПРОИЗВОДНИ: Подобен интегрален подход	235
4.4. РАДИАЦИОННО-ДИФУЗИОНЕН МОДЕЛ: Интегрален подход	239
4.5. СУБДИФУЗИОННО УРАВНЕНИЕ ОТ ЧЕТВЪРТИ РЕД МОДЕЛИРАЩО ПРОЦЕСА НА ТЕРМИЧНО НАБРАЗДЯВАНЕ: Интегрален подход за получаване на приближено решение на модела на Mullins	243
4.6. НОВО ПРИБЛИЖЕНО РЕШЕНИЕ НА ДИФУЗИЯ С НЕЛИНЕЙНОСТ НА FULITA: Случай на дифузионно контролирана адсорбция с правоъгълна изотерма	249
ЧАСТ 4: ОСНОВНИ РЕЗУЛТАТИ И ПРИНОСИ	257
Част В	
ОСНОВНИ РЕЗУЛТАТИ И ПРИНОСИ НА ДИСЕРТАЦИЯТА	259
ПРЕДГОВОР	261
1. Основни резултати	261
1.1. Приложение на интегралния метод	262
1.1.1. Приложения на интегралния метод към нелинейни и дифузионни модели с локални производни	262
1.1.2. Прилагане на интегралния метод към дифузионни модели със сингулярна памет	262
1.1.3. Нови модификации и обобщения на интегралния метод	263
1.1.4. Къде се намират DIM и MIM сред останалите приближени интегрални методи ?	264
1.2. Извод (синтез) на дифузионни модели на физични процеси с памет	266

Автореферат

НЕЛИНЕЙНИ И АНОМАЛНИ ПРИЛОЖНИ ДИФУЗИОННИ МОДЕЛИ:

Приближени решения, анализ, синтез и примери

1.3. Анализ на дифузионни модели с нелокална и несингулярна памет	267
1.4. Получаване на приближени решения на практически важни задачи	268
2. Основни приноси	269
3. А СЛЕД ТОВА?. Някои бележки чертаещи бъдещи изследвания	270

Част 1

НЕЛИНЕЙНИ ДИФУЗИОННИ МОДЕЛИ С ЛОКАЛНИ ПРОИЗВОДНИ (производни от цял порядък)

Кратко представяне

ЧАСТ 1

НЕЛИНЕЙНИ ДИФУЗИОННИ МОДЕЛИ С ПРОИЗВОДНИ ОТ ЦЯЛ ПОРЯДЪК

ПРЕДГОВОР

Тази част от дисертацията представя резултати върху интегрални решения на нелинейни дифузионни модели с цели (локални) производни и развитие на интегралния метод към нови техники на интегриране.

Основната цел на представените изследвания е да се покаже, че прилагайки директен метод на интегриране без предварителна линеаризация (най-често срещаната в литературата тази чрез трансформация на Кирхоф), е възможно получаване на приближено аналитично решение в затворена форма, за случаите на бавна дифузия (коефициенти на дифузия зависещи по линеен или степенен закон от концентрацията (температурата)).

Сред нелинейните модели разгледани в тази глава са и две версии на уравнението на Mullins за термично набраздяване, които успешно намериха своите решения чрез метода на двойно интегриране и нов метод с многократно интегриране.

ЧАСТ 1 е организирана по следния начин:

1. Глава 1.1 представя интегрално решение на нелинейно уравнение на нестационарна топлопроводност, със степен коефициент зависещ от температурата, използвайки начална трансформация на изходния модел в уравнение на топлинна вълна, а след това интегрално решение чрез просто (еднократно) интегриране.

2. Глава 3.2 представя интегрално решение на нелинейно уравнение на нестационарна дифузия, със степенен коефициент зависещ от температурата (концентрацията), но без предварителна трансформация на изходното уравнение във вълново, както това е направено в глава 1.1. Основният подход в това решение е началната нелинейна трансформация на дифузионния член на моделното уравнение, позволяваща директно

интегриране чрез използване на двете основни техники на интегралния метод и примери със задачите на Дирихле и Нюман.

3. Глава 1.3 развива метода приложен в **глава 1.2**, но за случая на коефициент на топлинна дифузия зависещ линейно от температурата, една класическа инженерна задача. Показани са директни интегрални решения на задачите на Дирихле и Нюман. Основната техника, преди прилагане на интегралния метод, е предварителната нелинейна трансформация на дифузионния член на моделното уравнение. Използвана е модификация на метода с двойно интегриране, при която е възможно прилагане на интегралния метод, както с локални така и с нелокални (дробни) производни по време (виж **част 2**).

4. Глава 1.4 е развитие на проблема разглеждан в **глава 1.3**, но с потенциално-степенна функционална зависимост на коефициента на топлинна дифузия от температурата, за случая на задачата на Дирихле.

5. Глава 1.5 предлага алтернативен подход при решаването на линейната задача на нестационарна топлопроводност (с постоянен коефициент на топлинна дифузия), за задачите на Дирихле и Нюман, с използване на допълнително уравнение от дробен порядък $1/2$, свързващо градиента и температурата на повърхността на средата (където се задава граничното условие).

6. Глава 1.6 представя иновативен подход, чрез нова техника на интегралния метод наречена **метод с многократно интегриране (MIM)**, който е приложим за дифузионни уравнения от висок ред (висок порядък на производната на дифузионния член). Показано е, че метода на просто интегриране и метода с двойно интегриране са частни случаи на метода с многократно интегриране. Методът е демонстриран с решение на модела на Mullins за термично набраздяване на повърхности чрез механизъм на повърхностна дифузия.

7. Глава 1.7 представя интегрално решение на нелинейното уравнение на Mullins за термично набраздяване на повърхности чрез механизъм на изпарение-кондензация. Показана е възможност за прилагане на метода с двойно интегриране, след предварителна трансформация на Broadbridge.

8. Глава 1.8 има спомагателен характер, показваща основния принцип на предварително трансформиране на нелинейни дифузионни членове в разглежданите модели. Разгледани са характеристиките на апроксимиращия параболичен профил с недефинирана експонента, използван във всички интегрални решения.

ГЛАВА 1.1

ПРИБЛИЖЕНО АНАЛИТИЧНО РЕШЕНИЕ НА НЕЛИНЕЕН МОДЕЛ * НА ТОПЛИННА ДИФУЗИЯ: Интегрален подход

Тази глава (и поддържащата я статия) представят приближено аналитично решение (a closed form approximate solution) на нелинейно дифузионно уравнение със степенна (power-law) нелинейност на дифузионния коефициент, чрез прилагане на интегрален метод. Основната стъпка е началното преобразуване на моделното уравнение като се избягва трансформацията на Кирхоф. Последващото приложение на интегралния метод е демонстрирано с решението на задачата на Дирихле и използване на параболичен профил с недефинирана експонента. Изследвани са случаи с предертерминирани експоненти от цял порядък и оптимизирани дробни експоненти.

1. ВЪВЕДЕНИЕ

Тази глава разглежда нелинейното дифузионно уравнение със степенна зависимост на дифузионния коефициент от концентрацията $a = a_0 u^m$ [1], с позитивен индекс (експонента) от цял порядък, а именно

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial x} \left(a_0 u^m \frac{\partial u}{\partial x} \right), \quad m > 0, \quad u(0, t) = 1, \\ u(x, 0) = 0 \quad (1)$$

Този модел описва множество от физични процеси и за разлика от линейното дифузионно уравнение ($m = 0$), уравнение (1) е еднородно параболично във всяка област където u не е нула, но се изражда (дегенерира) в близост на всяка точка, където $u = 0$ [2,3,4]. Основното свойство на това дегенериращо на

уравнение е, че всяко смущение се разпространява с крайна скорост като по този начин се формира фронт на решението. Фронтове от този тип се наблюдават при пълзящи течения [5,6], нелинейна топлопроводност [7,8], дифузия с дифузионен коефициент зависещ от концентрацията [2,9], и др.

Уравнението от втори порядък с $m = 2$ е познато като уравнение на течение в пореста среда (porous media equation) [10, 11,12]. Моделът с $m = 3$ представя процеси на оксидация на силиций [13] и апроксимации в теорията на смазката (the lubrication theory approximation) [5]. С $m = 1$ получаваме уравнението на Бусинеск [14] или нелинейно дифузионно уравнение с реакционен член (nonlinear reaction-diffusion equation) [15]. Много задачи, с различни положителни стойности на m , са разгледани в [3, 6, 16] и коментирани там литературни източници.

Съществуват няколко основни подхода за решаване на модела (1), а именно:

- Методи с крайно време (waiting-time solutions) [6, 14,17] описващи решението $u(x)$ зад фронта, за фиксирана позиция, и краен интервал от време (a finite waiting time) t_w .
- Асимптотични методи [11,13]
- Автомоделни методи [1,4,18,19] използващи Болцмановата автомоделна променлива.
- Аналитичен моментен метод спрямо решението в близост до фронта [2].
- Трансформацията на Кирхоф [20]

$w = \int_0^u u^m du$ е най-разпространения подход

* Публикувано като: [Hristov J., An Approximate Analytical \(Integral-Balance\) Solution to A Nonlinear Heat Diffusion Equation, Thermal Science, 19\(2\) \(2015\), pp. 723-733; DOI: 10.2298/TSCI140326074H](#)

позволяващ модела (1) да се трансформира в линейно дифузионно уравнение

$$\frac{\partial w}{\partial t} = a_0 \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \quad (2)$$

Решението на (2) може да бъде получено по аналитичен път [8, 13, 21, 22, 23, 24]. За яснота при анализа на съществуващото положение, методът на интегралния баланс, в най простата си форма (НВІМ), е използван за случай на топлопроводност в решение на Гудман [26] чрез квази-трансформация на Кирхоф включваща топлинните характеристики на повърхността $x = 0$.

2. ПРИБЛИЖЕНО РЕШЕНИЕ

Представеното по-нататък приближено решение разглежда задачата на Дирихле с използване на метода на топлинния интегрален баланс [26] и обобщен параболичен профил [27,28]. Този подход избягва трансформацията на Кирхоф чрез смяна на променливите $\varphi = u^m$ и $\tau = t/m$ позволяваща уравнение (1) да се представи във вида

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = a_0 \left[\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + m \varphi \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right],$$

$$\varphi(0, t) = 1, \varphi(x, 0) = 0 \quad (3)$$

Структурата на уравнение (3) показва, че временната еволюция на φ е резултат от разпространение на нелинейна вълна (първият член отясно) и дифузия (вторият член отясно) [12].

Приближеното решение на уравнение (3), с гранично условие на Дирихле ($u = u_s = 1, x = 0, t = 0$ и $u = 0, x \rightarrow \infty, t > 0$), е представено с параболичен профил с недефинирана експонента $\varphi_a = (1 - x/\delta)^q$ [27]

преди фронта ($0 < x < \delta(t)$) и гранични условия на Гудман $\varphi = 0, \partial \varphi / \partial x = 0$ за $x \geq \delta$ [26], а именно

$$\varphi_a = \left(1 - \frac{x}{\delta} \right)^q \Rightarrow u_a = \left(1 - \frac{x}{\delta} \right)^{\left(\frac{q}{m} \right)} \quad (4a, b)$$

Тук $u_a = (u - u_\infty) / (u_s - u_\infty)$ и

$\varphi_a = (\varphi - \varphi_\infty) / (\varphi_s - \varphi_\infty)$, са безизмерни.

Условията на фронта $\delta(t)$ се изпълняват защото за $x = \delta$ имаме: $u = 0$ и $\partial u / \partial x = 0$, а също и $\varphi = 0, \partial \varphi / \partial x = 0$.

Интегрирането на уравнение (3) от 0 до δ и прилагането на правилото на Лайбниц в лявата страна, води до

$$\frac{d}{d\tau} \int_0^\delta \varphi dx = a_0 \left[\int_0^\delta \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 dx + \int_0^\delta m \varphi \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} dx \right] \quad (5)$$

Използването на $\varphi_a(x)$ в (5) вместо $\varphi(x)$ води да обикновено диференциално уравнение (6а) определящо движението на фронта $\delta(t)$. Отчитайки началното условие $\delta(t=0) = 0$ и факта, че $\tau = t/m$, получаваме уравнение (6b)

$$\delta = \sqrt{a_0 t} \sqrt{2q(q+1)} \Delta_m \quad (6)$$

В израза (6) множителят $\sqrt{a_0 t} \sqrt{2q(q+1)} = \delta_0$ е дълбочината на фронта за $m = 0$ [27]. Отношението $\Delta_m = \delta / \delta_0$ показва как дълбочината на дифузионния слой се променя с увеличаване на степента на нелинейност на модела (нарастване на стойността на m), а именно

$$\Delta_m = \sqrt{\frac{1}{m(2q-1)}} \left[q \left(\frac{m+1}{m} \right) - 1 \right] \quad (7)$$

Апроксимиращият профил може да се представи (използвайки $\eta = x/\sqrt{a_0 t}$ и $F_q = \sqrt{2q(q+1)}$) във вида

$$\varphi_a = \left(1 - \frac{\eta}{F_q \Delta_m}\right)^q \quad (8)$$

$$u_a = \left(1 - \frac{\eta}{F_q \Delta_m}\right)^{\frac{q}{m}} \quad (9)$$

3. ОГРАНИЧЕНИЯ НАЛОЖЕНИ ВЪРХУ ЕКСПОНЕНТАТА НА ПРИБЛИЖЕНИЯ ПРОФИЛ

Апроксимиращия профил изпълнява условията на интегралното съотношение, а не на изходното дифузионно уравнение на топлопроводност. Следователно функцията $\sigma(u_a(x, t))$ представена чрез уравнение (10) трябва да е равна на нула ако u_a съвпада с точното решение .

$$\sigma(u_a(x, t)) = \frac{\partial u_a}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(a_0 u_a^m \frac{\partial u_a}{\partial x} \right) \quad (10)$$

С $n = q/m$ ние получаваме $u_a = (1 - x/\delta)^n$. Тогава, тъй като u_a е приближение, то ще търсим минимум на $\sigma(u_a(x, t))$ за определена стойност на експонентата n . В този случай получаваме

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_a}{\partial t} &= \frac{nx}{\delta^2} \frac{d\delta}{dt} \left(1 - \frac{x}{\delta}\right)^{n-1}, \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(u_a^m \frac{\partial u_a}{\partial x} \right) &= \frac{n[n(m+1)-1]}{\delta^2} \left(1 - \frac{x}{\delta}\right)^{n(m+1)-2} \end{aligned} \quad (11a,b)$$

Тогава, като пример, за $x = 0$ получаваме

$$\sigma_T(0, t) = -\frac{n[n(m+1)-1]}{\delta^2} \quad (12)$$

За положителни стойности на n , дифузионното уравнение се изпълнява при $n = 1/(m+1)$. От друга страна, условията на Гудман $u_a(\delta, t) = \partial u_a(\delta, t)/\partial x = 0$ налагат ограничението $n(m+1) > 1$, и следователно трябва да се изпълнява ограничението $n > 1/(m+1)$. По-нататък, за фронта на решението, при $x \rightarrow \delta$ имаме условието

$$\sigma_T(\delta, t) = -\frac{n[n(m+1)-1]}{\delta^2} \lim_{x \rightarrow \delta} \left(1 - \frac{x}{\delta}\right)^{n(m+1)-2} \quad (13)$$

Заедно с предишното ограничение, $n > 1/(m+1)$, условието (13) показва, че уравнението за топлопроводност се изпълнява при $x \rightarrow \delta$ когато $n > 2/(m+1)$.

4. ГРЕШКА НА АПРОКСИМАЦИЯ И ОПТИМАЛНИ ЕКСПОНЕНТИ

4.1. Критерии на Langford: Общ подход и експоненти q от цял порядък

Следвайки условията на критерия на Langford [29], грешката на апроксимация може количествено да се изчисли чрез средноквадратичната грешка за целия дифузионен слой, а именно

$$\begin{aligned} E_u &= \int_0^\delta \left[\frac{\partial u_a}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(a_0 u_a^m \frac{\partial u_a}{\partial x} \right) \right]^2 dx \\ E_\varphi &= \int_0^\tau \left[\frac{\partial \varphi_a}{\partial \tau} - a_0 \left(\frac{\partial \varphi_a}{\partial x} \right)^2 - a_0 m \varphi \frac{\partial^2 \varphi_a}{\partial x^2} \right]^2 dx \rightarrow \min \end{aligned} \quad (14a,b)$$

E_φ намалява във времето със скорост

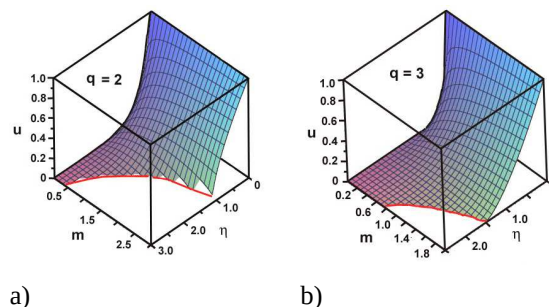
$$\delta^{-3} \equiv \tau^{-3/2}.$$

Класическото приложение на интегралния метод разглежда профили с цели стойности на експонентата q . Резултатите от няколко числени експеримента в тази посока са показани в Таблица 1. Данните сочат, че имаме минимална грешка от апроксимация, когато $e_{\varphi}(m, q) = e_{\varphi}(2, 2) \equiv 3a_0$. За три случая множителите F_q и Δ_m са показани също в Таблица 1.

Таблица 1. Коригиращи фактори на дълбочината на дифузионния слой и оценка на средноквадратичната грешка на апроксимация за случаи на предетерминирани експоненти от цял порядък.

предetermined by the slope of the curve in the order.								
	$m = 0$		$m = 1$		$m = 2$		$m = 3$	
	Δ_m	Δ_m	F_q	Δ_m	F_q	Δ_m	F_q	Δ_m
$q = 2$	-	-	3.4 64	1	3.4 64	0.5 77	3.4 64	0.1 92
q/m	-	-	2		1		0.6 66	
$L_2 \equiv e_{\varphi}(m)$		-			$3D_0$		$4.5D_0$	
$q = 3$			4.8 99		4.8 99		4.8 99	
q/m	-	-	3	1	1.5	0.5 91	1	0.4 47
$L_2 \equiv e_{\varphi}(m)$					$(72/7)D_0$		$(108/6)D_0$	

Числените експерименти с фиксирани цели стойности на q позволяват да се илюстрират температурните разпределения с вариации на m и η . Преди всичко, графиките на Фиг. 1a,b ясно показват, че с увеличаване на стойността на експонентата m е налице ретардация на фронта $\delta(t)$. Този факт е добре представен чрез линията **A** (червена линия в цветните фигури) разположена в равнината $m-\eta$. Решенията демонстрират качествено ретардацията на фронта с нарастване на стойността m . Фронтът на проникващия дифузионен слой става все по-къс с нарастване на нелинейността на дифузионния коефициент



Фиг.1. Приближени решения като функции на автомоделната променлива η и $m > 1$ за две фиксирани експоненти на апроксимацията профил : $q=2$ and $q=3$

4.2. Модифициран метод на Mitchell-Myers [28]

Следвайки подхода на Mitchell-Myers [28], можем да представим приближения профил във вида $V = (1 - x/\delta)^n$ (виж 4a) с въвеждане на нова безизмерна координата $\xi = x/\delta$. Следователно, можем да представим уравнение (3) във вида

$$\frac{\partial V}{\partial t} - \frac{d\delta}{dt} \frac{\xi}{\delta} \frac{\partial V}{\partial \xi} = a_0 \left[\frac{m}{\delta^2} \left(\frac{\partial V}{\partial \xi} \right)^2 + \frac{V^m}{\delta^2} \frac{\partial^2 V}{\partial \xi^2} \right] \quad (18)$$

Оценката на апроксимацията ще бъде направено на базата на средноквадратичната грешка

$$E_{MT} = \int_0^1 \Phi_T^2(\xi, t) d\xi = \int_0^1 \left[\delta \frac{d\delta}{dt} \xi \frac{\partial V}{\partial \xi} + m \left(\frac{\partial V}{\partial \xi} \right)^2 - V^m \frac{\partial^2 V}{\partial \xi^2} \right]^2 d\xi \quad (19)$$

Техниката развита в [28] използва факта, че за $\text{for } m=0$ произведението $\delta(d\delta/dt)$ не зависи от времето и функцията E_{MT} зависи само от q . Интегрирането на (19) с използване на НВІМ решения (6) и (9) позволява да представим E_{MT} като

$E_{MT(HBI)} = e_{MT(HBI)}(q, m) \delta(d\delta/dt)$, където $e_{MT(HBI)}(n, m)$ е независима от времето.

В този момент, се използват две възможности:

- 1) Минимизация на $E_{MT(HBI)}$ по отношение на n , за дадено m , в зоната $n > 1$
- 2) Да решим уравнението $E_{MT(HBI)}(n, m) = 0$, намирайки реалните положителни корени, а след това да изберем този, който осигурява минимум на $E_{MT(HBI)}$.

Прилагайки първия подход, всички експоненти, като правило, се получават по-големи от 1 (виж Таблица 2). Обратно, с втория подход всички оптимални експоненти са по-малки от 1.

4.3. Определяне на коректната експонента на профила и числени експерименти

Определянето на оптималната експонента е основният въпрос в крайното дефиниране на решението и за да намерим точния отговор ние ще сравним нашите резултати с класическото решение (чрез редове) на Heaslet-Alksne [32], както това е направено в други изследвания (виж лит.2, като пример).

Графичното представяне на Фиг. 2а ясно показва, че вдлъбнатите профили получени при оптимални $n > 2$ са разположени много далеч от референтните решенията, докато изпъкналите профили (с $n < 1$) (виж Фиг.2b) са твърде близо до тях. Освен това, профилите на Фиг.3 ясно показват, че решенията чрез HBIM са по-адекватни (по-точни и по-близо до решенията чрез редове) с нарастване на стойността на m . Тези профили са представени

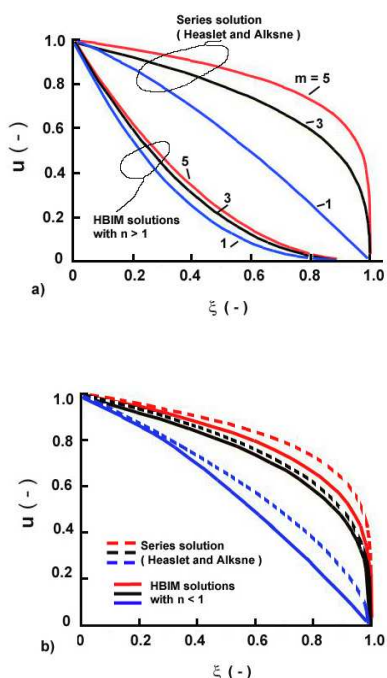
във формата $u(\xi, t) = (1 - \xi)^n$, където $0 < \xi = x/\delta < 1$.

Таблица 2. Оптимални експоненти на параболичния профил определени по метода на Mitchell-Myers [28] и решения чрез HBIM. Два подхода за определяне на оптималната експонента.

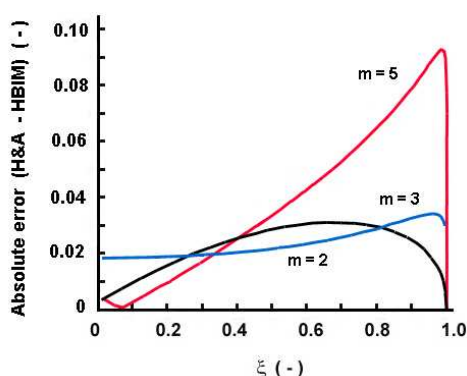
	Чрез числено решение на $E_{MT(HBI)}$, $n < 1$		Чрез минимизация на $E_{MT(HBI)}$, $n > 2$	
	n_{opt}	$E_{MT(HBI)} = f(n)$	n_{opt}	$E_{MT(HBI)} = f(n)$
$m = 0.5$	0.666		3.319	6.330
$m = 1$	0.610	0.02790	2.681	11.0683
$m = 2$	0.509	7.47×10^{-3}	2.395	29.4347
$m = 3$	0.302	2.22×10^{-3}	2.270	60.5617
$m = 4$	0.293	7.524×10^{-3}	2.187	106.697
$m = 5$	0.256	1.11×10^{-3}	2.126	170.220

Абсолютните грешки между референтите решения на Heaslet-Alksne [32] и тези получени в това изследване (виж Фиг. 3) показват приемливи разлики, *имайки в предвид, че решенията чрез редове също са приближени.*

Графиките на Фиг.4 позволяват ясно да се види ретардацията на проникващия фронт, като ефект от нелинейността с нарастване на стойността на параметъра m . С увеличаването на m този ефект е видим, когато η се използва като независима променлива (Фиг. 4), но става неразличим, когато профилите се представят чрез $\xi = x/\delta = \eta/F_q \Delta_m$ като независима променлива (виж Фиг. 2



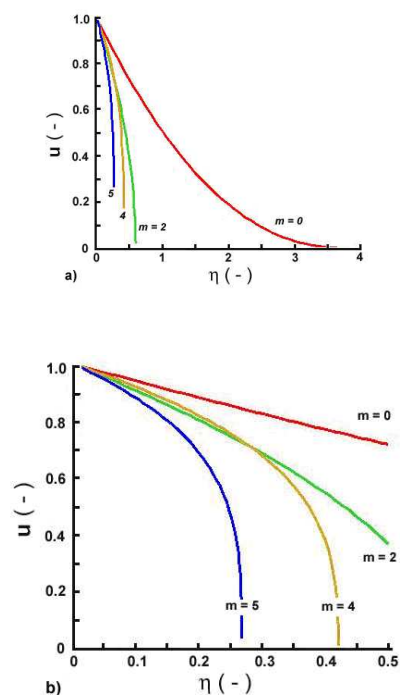
Фиг.2. Безизмерни температурни профили с различни степени на нелинейност (представени чрез параметъра m) сравнени с решенията получени чрез редове на Heaslet-Alksne [32] (4 члена на реда)
 а) HBIM решения за $n > 1$ определени чрез минимизация на $E_{MT(HBI)}$ в границите $2 < n < 3$ (виж Таблица 2);
 б) HBIM решения с $n < 1$ (означенията са като тези на фиг. а) (n_{opt} са определени чрез числено решение на $E_{MT(HBI)} = 0$ - виж Таблица 2)



Фиг.4. Абсолютни грешки на апроксимация при сравнение на референтните решения на Heaslet-Alksne [32] и настоящите получени чрез HBIM.

Оптималните експоненти за решения чрез HBIM са $n < 1$ и само в тези случаи

параболичният профил (8ab) генерира изпъкнали разпределения със стръмни фронтове. Когато $n > 1$ параболичният профил генерира вдлъбнати разпределения като тези показани на Фиг. 3а.



Фиг.5. Безразмерни температурни профили с различна степен на нелинейност представена чрез параметъра m . а) Профили с голяма дистанция; б) Профили с къса дистанция.
 Бележка: n_{opt} е определена чрез числено решение на $E_{MT(HBI)} = 0$ - виж Таблица 2

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Hill, J.M., Similarity solutions for nonlinear diffusion- a new integration procedure, *J. Eng. Math*, 23 (1989), 1, pp.141-155;
- [2] Prasad, S.N., and Salomon, J.B., A new method for analytical solution of a degenerate diffusion equation, *Adv. Water Research*, 28 (2005), 10, pp. 1091-1101.
- [3] N. F. Smyth, N.F., Hill, J.M., High-Order Nonlinear Diffusion, *IMA Journal of Applied Mathematics*, 40 (1988), 1, pp. 73-86.
- [4] Zel'dovich, Ya.B., Kompaneets, A. S., On the theory of heat propagation for temperature dependent thermal conductivity, in: Collection Commemorating the 70th Anniversary of A. F. Joffe, *Izv. Akad. Nauk SSSR*, 1950, pp. 61-71.
- [5] Buckmaster, J., Viscous sheets advancing over dry beds, *J. Fluid Mech.*, 81 (1977), 4, pp. 735-756.

- [6] Marino, B. M., Thomas, L. P., Gratton, R., Diez, J. A., Betelu, S., Waiting-time solutions of a nonlinear diffusion equation: Experimental study of a creeping flow near a waiting front, *Physical Review E*, 54 (1996),3, pp, 2628-2636.
- [7] Lonngren, K.E., Ames, W.F., Hirose, A., Thomas J., Field penetration into plasma with nonlinear conductivity, *The Physics of Fluids*, 17 (1974), 10., pp. 19191-1920.
- [8] Khan, Z.H., Gul, R., Khan, W.A., Effect of variable thermal conductivity on heat transfer from a hollow sphere with heat generation using homotopy perturbation method, In Proc. ASME Summer Heat Transfer Conf, 2008, August 1-14, 2008, Article HT2008-56448, Jacksonville, Florida, USA.
- [9] Pattle, R. E. Diffusion from an instantaneous point source with concentration-dependent coefficient, *Quart.J. Mech. Appl. Math.*, 12 (1959), 4, pp. 407-409.
- [10] Muskat, M., *The Flow of Homogeneous Fluids through Porous Media*, McGraw-Hill, New York,1937.
- [11] Peletier, L.A., Asymptotic behavior of solutions of the porous media equations, *SIAM J. Appl. Math.*, 21 (1971), 4, pp.542-551.
- [12] Aronson, D.G., *The porous medium equation*, in Nonlinear Diffusion Problems, Lecture Notes in Math. 1224, A. Fasano and M. Primicerio, eds., Springer, Berlin, 1986, pp. 1–46.
- [13] King, J.R., *The isolation oxidation of silicon: The reaction-controlled case*, *SIAM J. Appl. Math.*, 49 (1989),4, pp.1064–1080.
- [14] Lacey, A. A., Ockendon, J. R., Tayler, A. B. 1982, Waiting-time solutions of a nonlinear diffusion equation. *SIAM J. appl. Math.* 42 (1982),6, pp. 1252-1264.
- [15] Atkinson, C., Reuter, G.E.H., Ridler-Rowe, C.J., Traveling wave solutions for some nonlinear diffusion equations, *SIAM J. Appl. Math.*, 12 (1981), 6, 880- 892.
- [16] Strunin, D.V., Attractors in confined source problems for coupled nonlinear diffusion, *SIAM J. Appl. Math.*, 67 (2007) ,6, pp. 1654–1674,
- [17] Nasser, M., Daneshbod, Y., Pirouz, M.D., Rakhshandehroo, Gh.R., Shirzad, A., New analytical solution to water content simulation in porous media, *J. Irrigation and Drainage Eng.*, 2012, April, pp. 328-335.
- [18] Hill, D.L., Hill, J.M., Similarity solutions for nonlinear diffusion-further exact solutions, *J. Eng. Math.*, 24 (1990), 1, pp.109-124;
- [19] Hill, J.M., Hill, D.L., On the derivation of first integrals for similarity solutions, *J. Eng. Math.*, 25 (1991), 2, pp.287-299.
- [20] Tomatis, D. Heat Conduction in nuclear fuel by the Kirchhoff transformation, *Ann. Nucl. Energy.* 57 (2013), July, pp.100-105,
- [21] Knight, J.H., Philip, J.R., Exact solutions in nonlinear diffusion, *J. Eng. Math.* , 8 (1974), 3, pp. 219-227.
- [22] Kolpakov, V.A., Novomelski, D.N., Novozhenin, M.P., Determination of the surface temperature of sample in region of its interaction with a nonelectrode plasma flow using the Kirchhoff transformation of a quadratic function, *Technical Physics*, 58 (2013), 11, pp.1554-1557.
- [23] King, J.R., Integral results for nonlinear diffusion equations, *J. Eng. Math.*, 25 (1991), 2, pp.191-205.
- [24] Paripour, M., Babolian, E., Saeidian, J., Analytic solutions to diffusion equations, *Math. Comp. Model.*, 51 (2010),5-6, pp.649-657.
- [25] Walker, G.G., Scott, E.P., Evaluation of estimation methods for high unsteady heat fluxes from surface measurements, *J. Thermophys. Heat Transfer*, 12 (1998), 4, 543-551.
- [26] Goodman T.R., Application of Integral Methods to Transient Nonlinear Heat Transfer, *Advances in Heat Transfer*, T. F. Irvine and J. P. Hartnett, eds., 1 (1964), Academic Press, San Diego, CA, pp. 51–122.
- [27] Hristov, J. The heat-balance integral method by a parabolic profile with unspecified exponent: Analysis and Benchmark Exercises, *Thermal Science*, 13(2009), 2, pp.27-48.
- [28] Mitchell, S. L., Myers, T. G., Application of standard and refined heat balance integral methods to one-dimensional Stefan problems,” *SIAM Review*, 52 (2010), 1, pp. 57–86.
- [29] Langford , D., The heat balance integral method, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 16 (1973),12, pp.2424– 2428.
- [30] Myers, J.G., Optimizing the exponent in the heat balance and refined integral methods, *Int. Comm. Heat Mass Transfer*, 36 (2009), 2, pp. 143-147.
- [31] Sadighi, A., Ganji, D.D., Exact solutions of nonlinear diffusion equations by variational iteration method, *Comp. Math Appl.*, 54 (2007), 7-8, pp. 1112-1121.
- [32] Heaslet, M.A., Alksne, A. Diffusion from a fixed surface with a concentration-dependent coefficient, *J. Soc. Ind. Appl. Math.*, 9 (1961), 4, pp.463-479.

ГЛАВА 1.2

НЕСТАЦИОНАРНА ДИФУЗИЯ НА ТОПЛИНА (МАСА) СЪС СТЕПЕНЕН* ДИФУЗИОНЕН КОЕФИЦИЕНТ:

Интегрално решение в полубезкрайна среда и стационарни гранични условия

Получени са приближени аналитични решения за нестационарна нелинейна дифузия със степенен, зависещ от температурата (концентрацията), коефициент на дифузия, за полу-безкрайна среда и стационарни гранични условия. Използван е интегрален метод, при който се избягва често използваната линеаризация чрез трансформация на Кирхоф. Основният принос при развитието на решението е използването на предварителна трансформация на дифузионния член на уравнението и прилагането на техника с двойно интегриране. Представени са решения на задачите на Дирихле и Нюман, сравнени със съществуващи числени и аналитични решения публикувани в литературата.

1. ВЪВЕДЕНИЕ

Настоящият анализ разглежда нестационарна дифузия със степенен дифузионен коефициент, зависещ от температурата (концентрацията), представян чрез следния модел

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (1a)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(a(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (1b)$$

Дифузионният коефициент, зависещ от температурата (концентрацията) може да се представи чрез степенна зависимост $a = a_0 \left(T/T_{ref} \right)^m$, $m > 0$, която е свързана със зависещият от температурата коефициент на

топлопроводност $k = k_0 \left(T/T_{ref} \right)^m$, с допускането че произведението ρC_p не зависи от температурата.

Моделът (1a-b), за разлика от линейното дифузионно уравнение ($m = 0$), е еднородно параболично във всички области, където T не е нула, но дегенерира в околността на всяка точка, където $T = 0$ [2,3,4]. Основната характеристика на това дегенеративно поведение е, че всяко смущение възникнало на границата се разпространява в средата с крайна скорост и добре дефиниран фронт на решението.

Важно е да се отбележи, че независимо от факта, че задачата (1) е дефинирана като нестационарна топлопроводност съществуват много физични процеси описвани чрез модела (1a) [5, 6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16]

Трудностите за получаване на решения за този клас от уравнения са мотивирали множество от методи, както точни така и приближени. Съществуват няколко основни подхода за решения на модела (1a), а именно:

- Решение с време закъснение (waiting-time solutions) [6,14,17] представлящи еволюцията на $u(x)$ зад фронта, при фиксирана пространствена позиция, по време на краен период от време (a finite waiting time t_w).
- Асимптотични методи [11,13]
- Решения [1, 4,13, 18,19] използващи автомоделната променлива на Болцман.
- Аналитични методи, използващи моментен подход, разглеждащи решението в близост до фронта [2].

* Публикувано като: [Hristov J., Integral solutions to transient nonlinear heat \(mass\) diffusion with a power-law diffusivity: a semi-infinite medium with fixed boundary conditions, Heat Mass Transfer, 52 \(3\) \(2016\) , pp.635-655, DOI: 10.1007/s00231-015-1579-2.](#)

Трансформацията на Кирхоф [20] , където крайното решение може да се получи както по аналитичен път така и чрез числени методи [8, 13, 21, 22, 23, 24].

В случаите, когато дифузионният процес е нелинеен на границата, като тази нелинейност засяга зададения поток, като гранично условие, не съществуват точни аналитични решения и най-често се използват приближени такива или числени методи.

2. ИНТЕГРАЛЕН МЕТОД: Стратегия за развитие на решението

2.1. Апроксимиращ профил и безизмерни уравнения

Решенията използват метода с просто интегриране (НВИМ) [26] и техниката с двойно интегриране (RIM) [30-32] чрез апроксимиращ параболичен профил с недефинирана експонента [30-34]

$$T_a = T_s (1 - x/\delta)^n \quad (5)$$

Профилът (5) изпълнява условията на Гудман [26] и граничните при $x = 0$ а именно

$$T(0, t) = T_s \text{ or } k \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=0} = q_0 \quad (6a, b)$$

$$T(\delta, t) = T_0 = 0$$

$$\text{or } k \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=\delta} = 0 \quad (6c, d)$$

Безизмерният (машабиран) коефициент на дифузия, в случай на топлопроводност, се представя във вида $a = a_0 (T/T_{ref})^m$, където $T_{ref} = T_0$ е началната референтна температура на средата. От друга страна, при моделиране на дифузия на маса, коефициентът на дифузия трябва да бъде машабиран с

повърхностната концентрация C_s , т.е. като

$$D = D_0 (C/C_s)^m \quad , \quad \text{защото началната}$$

концентрация C_0 в средата е нула. В този контекст, за случая на топлинна дифузия с $T_{ref} = T_0 \neq 0$, функционалната зависимост може

премашабира (rescaled) като

$$a_{eff} u^m = a_0 k_T (T/T_s)^m \quad , \quad \text{където}$$

$$k_T = (T_s/T_0)^m = const. \text{ и } a_{eff} = a_0 k_T .$$

Следователно, въвеждайки безизмерната променлива $u = (T - T_0)/(T_s - T_0)$, която се редуцира до $u = T/T_s$ за $T_0 = 0$, ние получаваме следният апроксимиращ профил

$$u_a = u_s (1 - x/\delta)^n \quad (7)$$

От тук нататък, за простота и яснота на изложението, ние ще използваме безизмерната форма (само по отношение на зависимата променлива) (8a) на основното моделиращото уравнение (1),

За случай на зададена температура

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(a_0 u^m \frac{\partial u}{\partial x} \right), \quad u(0, t) = u_s = 1 \quad (8a, b)$$

За зададен поток, безизмерното гранично условие е

$$-k(u) \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{x=0} = q_0 \quad (8c)$$

Граничните условия на Гудман в безизмерна форма са

$$u(\delta, t) = u_0 = 0 \text{ or } k \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{x=\delta} = 0 \quad (9a, b)$$

2.2. Техники на интегриране: основни стъпки и подобрения свързани с решението на нелинейния проблем

2.2.1. Метод с просто интегриране (НВИМ)

В този случай основното интегрално съотношение е

$$\int_0^\delta \frac{\partial u}{\partial t} dx = - \left(\frac{a_0}{m+1} \frac{\partial u^{m+1}}{\partial x} \right)_{x=0} \quad (10)$$

2.2.2. Подобрен метод с двойно интегриране (RIM)

В този случай основното интегрално съотношение е (15)

$$\frac{d}{dt} \int_0^{\delta} x u dx = \frac{a_0}{m+1} u^{m+1}(0, t) \quad (11)$$

Уравнение (11) е основното интегрално съотношение на метода с двойно интегриране, когато коефициента на дифузия зависи от температурата (концентрацията) чрез степен закон

3. РЕЗУЛТАТИ

3.1. Пример 1: Постоянна температура като гранично условие за $x = 0$

3.1.1. Решение с НВІМ

Интегрирането на (8а), с граничните условия (8b), по дължина на дифузионния слой, прилагайки апроксимиращия профил (7) с $u(0, t) = u^{m+1}(0, t) = 1$, води до

$$\left(\frac{a_0}{m+1} \frac{\partial u^{m+1}}{\partial x} \right)_{x=0} = a_0 (n/\delta) \quad (12)$$

Тогава, използвайки апроксимиращия профил (7) в лявата страна на (12), получаваме

$$\delta_{T(\text{НВІМ})} = \sqrt{a_0 t} \sqrt{2n(n+1)} \quad (13)$$

Следователно, при това гранично условие, използването на трансформацията (11) не подобрява метода по отношение на класическия НВІМ, защото, отново, *градиентът се определя чрез апроксимиращия профил*. Освен това, нелинейността в основното уравнение, представена в уравнението чрез експонентата m , изчезва в крайната форма за дълбочината на дифузионния слой (13). Следователно, методът с просто интегриране (НВІМ) е неприложим за този тип нелинейни

задачи, когато моделното уравнение е (1а). За да се използва НВІМ за задачата на Дирихле, когато моделът е представен чрез уравнение (1), е необходимо да се извърши предварително трансформацията представена чрез уравнение (3) [27] (Глава 1.1).

3.1.2. Решение с RIM (DIM)

Прилагайки уравнение (115) с $u(0, t) = u^{m+1}(0, t) = 1$ получаваме

$$\frac{1}{(n+1)(n+2)} \frac{d\delta^2}{dt} = \frac{a_0}{m+1} \quad (14)$$

Тогава, дълбочината на проникване е

$$\delta_{T(\text{DIM})} = \sqrt{a_0 t} \sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{m+1}} \quad \text{или}$$

$$\delta_{T(\text{DIM})} = \sqrt{a_0 t} F_{n,m}, \quad F_{n,m} = \sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{m+1}} \quad (15a,b,c)$$

Тъй като $m > 0$, тогава от (15а) и (15b) имаме, че $\delta_{T(\text{DIM})} < \delta_{T(\text{DIM})(m=0)}$, като директна манифестация на *ретардацията на фронта с нарастване на стойността на експонентата m* . В този контекст, ние обръщаме внимание на анализа в [35], където дифузионните процеси със степенна зависимост се класифицират като: бавна дифузия (*slow diffusion*) за $m > 0$ и бърза дифузия (*fast diffusion*) за $m < 0$.

3.2. Пример 2: Зададен поток като гранично условие за $x = 0$

Със зададен топлинен поток на границата $x = 0$

$$-k(T) \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=0} = q_0 \quad (16a)$$

и прилагайки граничните условия на Гудман (9a,b) получаваме

$$T_a = T_s \left(1 - \frac{x}{\delta} \right)^n \quad (160b)$$

Тогава, използвайки безизмерната функционална зависимост $k(T) = k_0 (T/T_{ref})^m$, граничното условие (16a) се представя като

$$-\left(k_0 T^m \frac{\partial T}{\partial x}\right)_{x=0} = q_0 T_{ref}^m = Q_0 \quad (17a)$$

От използвания апроксимиращ профил (16b) имаме, че

$$\frac{\partial}{\partial x} T^{m+1}(0, t) = -T^{m+1}(0, t) \frac{n(m+1)}{\delta} \quad (18)$$

Следователно, повърхностната температура се представя като

$$T_a(0, t) = \left(\frac{Q_0}{k_0} \frac{\delta}{n}\right)^{\frac{1}{m+1}} \quad (19)$$

С мащабираната променлива

$\theta_a = T_a / (Q_0 / k_0)^{1/(m+1)}$ (ние използваме символа θ за се отличава решението от това в **Пример 1**), профилът (16b) се представя във вида

$$\theta_a = \left(\frac{\delta}{n}\right)^{\frac{1}{m+1}} \left(1 - \frac{x}{\delta}\right)^n \quad (20)$$

3.2.1. Решение с HBIM

Използването на интегралното съотношение (10) с профила (20) води до

$$\delta_{q(HBIM)(m>0)} = (a_0 t)^{\frac{m+1}{m+2}} n^{\frac{1}{m+2}} (n+1)^{\frac{m+1}{m+2}} \quad (21)$$

За $m = 0$ получаваме класическото решение на HBIM

$$\delta_{q(HBIM)(m=0)} = \sqrt{a_0 t} \sqrt{n(n+1)} \quad (22)$$

Очевидно е, че в случай на зададен поток като гранично условие, за $x = 0$ и $m > 0$ ние губим класическото поведение на дифузионния фронт $\delta(t)$ (the classical square-root behavior of the penetration depth was lost).

3.2.2. Решение с DIM

С основното интегрално съотношение на DIM, модифицирано за случая на $m > 0$ и с профила (23), получаваме

$$\begin{aligned} \delta_{qDIM(m>0)} &= \\ &= (a_0 t)^{\frac{m+1}{m+2}} \left[n^m (n+1)((n+2)) \left(\frac{m+2}{(m+1)(2m+3)} \right) \right]^{\frac{m+1}{m+2}} \end{aligned} \quad (23)$$

За линейната ситуация ($m = 0$) имаме $a = a_0$ и от (23) дълбочината на проникване е

$$\delta_{qDIM(m=0)} = \sqrt{a_0 t} \sqrt{\frac{2(n+1)((n+2))}{3}} \quad (24)$$

Изразът (28) е решението получено в [31,32]

4. ОПТИМАЛНИ ЕКСПОНЕНТИ НА ПРОФИЛА И ГРЕШКИ НА АПРОКСИМАЦИЯ

Тъй като, както HBIM така и DIM са моментни методи, точността на апроксимация зависи от стойността на експонентата n . В класическите приложения [26] се използват $n = 2$ и $n = 3$. Недефинираната експонента на профила е анализирана в [33] и проблемът е развит след това в две основни направления: i) Постоянно експонента, определена чрез минимизиране на средноквадратичната грешка на апроксимация [31, 33, 37], и ii) променлива (адаптираща се) експонента [38].

Настоящият анализ се фокусира върху минимизиране на грешката от апроксимация по цялата дължина на дифузионния слой, с използване на постоянна (не зависеща от времето) експонента. За тази цел са използвани два основни подхода

- Сравнение (приравняване) на резултатите за $\delta(t)$ получени чрез HBIM и DIM
- Глобална минимизация, с прилагане на модифицирания метод на Mitchell and Myers [32,39]

4.1. Приравняване на резултатите за

$\delta(t)$ получени чрез HBIM и DIM

Тук ние търсим директно и лесно определяне, макар и приближено, на експонентата n , което ще даде информация за нейното поведение, при условие, че един или

повече параметри (в сравнение с линейните задачи [26, 28, 29, 30-34] решени чрез интегралния метод) контролират апроксимиращия профил. Ние ще използваме, т.н. комбиниран интегрален метод (Combined Integral Method, **CIM**) [37,39]. В съгласие с идеята на CIM дълбочините на дифузионния слой получени чрез HBIM и DIM трябва да съвпадат. Следователно, за задачата с постоянна температура като гранично условие, получаваме

$$\begin{aligned} \delta_{T(HBIM)} = \delta_{T(DIM)} &\Rightarrow \sqrt{2n(n+1)} = \\ &= \sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{m+1}} \Rightarrow n_m^T = \frac{2}{2m+1} \end{aligned} \quad (25a,b)$$

За $m = 0$ ние получаваме експонентата определена от Гудман, т.е. $n_{m=0} = 2$. С нарастване на нелинейността, обаче, т.е. с нарастване на стойността на m , получаваме, че експонентите изпълняват условието $n_m^T < 1$, когато $m > 0$. Тези резултати са представени в **Таблица 1**, а качествените резултати са показани на Фиг.1а. Общо казано, поведението на температурните профили на Фиг.1 потвърждава *качествено* точните аналитични решения [2, 9,14,16,18,19,21,23], а по-точно, че с нарастване на стойността на m профилите стават все *по-стръмни* (*the profile becomes steeper*) и *отсичат все по-къси дължини на дифузионния слой* (*cuts shorter penetration depths*) от абсцисата. Тъй като параболичния профил изпълнява условията на Гудман и интегралните съотношения на HBIM и DIM) за всяко положителна стойност на n , тези резултати не противоречат на предишните изследвания (виж като примери [31, 33, 48, 39]). Независимо от това, обаче, трябва да бъдат наложени ограничения изискващи

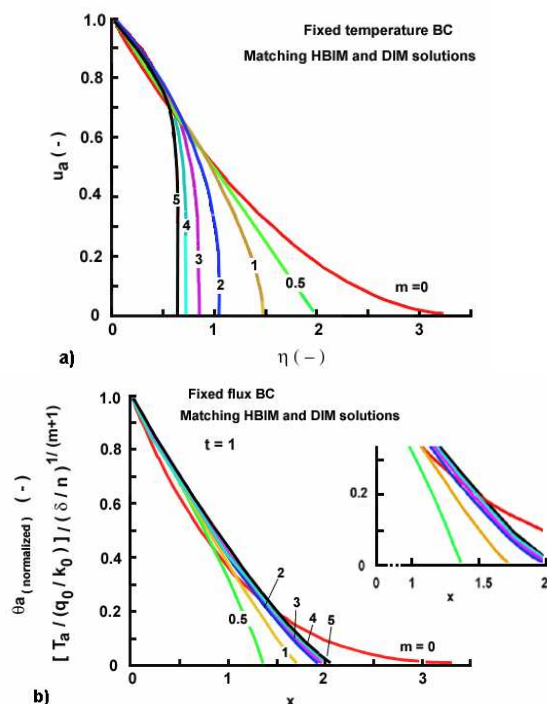
апроксимиращия профил за изпълнява условията на основното дифузионно уравнение (1а или 6а), които ще бъдат дискутирани по-нататък в съгласие с критерия на Langford [40] и метода за оптимизация на Mitchell-Myers [39].

Аналогично, когато зададен поток е гранично условие, приравнявайки (21) и (23) получаваме

$$n^{\left(\frac{m^2+m-1}{m+1}\right)} (n+2) = \frac{(m+1)(2m+3)}{m+2} \quad (26)$$

За $m = 0$ получаваме $(n+2)/n = 3/2 \Rightarrow n_0^q = 4$, т.е. решението получено в [39]. За всяко положително $m > 0$ е необходимо да се реши уравнение (30) и, като пример: за $m = 1$ получаваме $\sqrt{n}(n+2) = 10/3$ и $n_1^q = 1.1324$, а за $m = 2$ получаваме $n^{5/3}(n+2) = 21/4$ и $n_2^q = 1.3171$, и т.н. Стойностите на експонентите n_m^q (уравнение (26) е решено числено с помощта на Maple) представени в **Таблица 1**. Профили с някои от тези експоненти са показани на Фиг.1b.

В резюме, процедурата с приравняване на дифузионните дълбочини води до резултати, които, до този момент, са само *качествени*, показващи какъв ефект има на параметъра m върху дължината на фронта δ и формата на приближения профил. *Приближените профили*, обаче, показани на Фиг. 1a,b не са *оптималните*, защото предопределените стойности на експонентите не осигуряват минимална грешка на апроксимация. Оптималните експоненти са проблем разгледан в следващите точки.



Фиг.1. Безизмерни температурни профили с експоненти на параболичния профил определени чрез сравнение на дифузионните дълбочини дефинирани от решенията на HBIM и DIM

- а) За зададена температура като гранично условие
б) За зададен поток като гранично условие, при $t = 1$

4.2. Подход с глобална оптимизация

4.2.1. Ограничения върху експонентата n

Преди всичко, ние обръщаме внимание на факта, че приближените профили са решение на интегралните съотношения, **но не и на изходното дифузионно уравнение.**

Тогава функцията на остатъка е $\varphi(u_a(x, t))$

$$\varphi(u_a(x, t)) = \frac{\partial u_a}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(a_0 u_a^m \frac{\partial u_a}{\partial x} \right) \quad (27)$$

$\varphi(u_a(x, t))$ трябва да бъде равна на нула, ако u_a съвпада с точното решение. Ако това не е така, то трябва да се достига минимум за дадена стойност на експонентата n (единствения неопределен параметър на апроксимиращия профил). Ние ще използваме дефиницията (31) за определяне на ограниченията, които трябва да изпълнява експонентата n .

Таблица 1. Експоненти определени чрез сравнение на дълбочините на проникване определени чрез HBIM и DIM

	$m = 0$	$m = 0.5$	$m = 1$	$m = 2$	$m = 3$	$m = 4$	$m = 5$
Зададена температура като гранично условие							
n	2	1	0.666	0.4	0.285	0.222	0.1818
$e_{MT(DIM)}$	40.40	40.40	166.83	1.0672	0.5721	2.312	0.5962
Зададен поток като гранично условие							
n	4	0.8603	1.1324	1.3171	1.2497	1.2774	1.2679
$e_{Mq(DIM)}$	-	1.2467	0.7599	0.4168	3.3575	8.2967	15.414

- Зададена температура като гранично условие

С профил $u_a = (1 - x/\delta)^n$ и за $x = 0$ получаваме

$$-\varphi_r(0, t) = -\frac{n[n(m+1)-1]}{\delta^2} \Rightarrow n = \frac{1}{m+1} \quad (28)$$

Следователно, търсейки положителни стойности на n , дифузионното уравнение се

изпълнява за $n = 1/(m+1)$. От друга страна, за да се изпълнят условията на Гудман на фронта, т.е. $u_a(\delta, t) = \partial u_a(\delta, t)/\partial x = 0$, е необходимо да се изпълнява условието $n(m+1) > 1$, а от тук следва, че $n > 1/(m+1)$. Следователно, следвайки оценките получени при приравняване на изразите за $\delta(t)$ получени чрез НВІМ и DIM, имаме че $n = 1/(m+1/2)$, и следователно ограничението е изпълнено.

За $x \rightarrow \delta$ имаме

$$-\frac{n[n(m+1)-1]}{\delta^2} \lim_{x \rightarrow \delta} \left(1 - \frac{x}{\delta}\right)^{n(m+1)-2} \quad (29)$$

Отчитайки предходното ограничение, $n > 1/(m+1)$, то от (29) следва, че дифузионното уравнение има решение за $x = \delta$, когато $n > 2/(m+1)$. Това второ ограничение съвпада с условието следващо от изискването $\delta_{T(\text{НВІМ})} = \delta_{T(\text{DIM})}$. За $m = 0$ получаваме, че е необходимо условието $n > 2$, както вече е установено в [32].

• **Зададен поток като гранично условие**

С профил $\theta_a = (\delta/n)^{1/(m+1)} (1-x/\delta)^n$ и $x = 0$ имаме $\varphi_a(0, t) = -[n(m+1)-1]/\delta$, което води до условието $n > 1/(m+1)$. Това ограничение съвпада полученото при зададена температура като гранично условие. По-нататък

$$\frac{n(m+1)-1}{\delta} \lim_{x \rightarrow \delta} \left(1 - \frac{x}{\delta}\right)^{n(m+1)-2} \quad (30a, b)$$

$$n > \frac{2}{m+1}$$

Условието (30b) е по-силно, защото $2/(m+1) > 1/(m+1/2)$. В този случай, експонентите определени чрез процедурата на

приравняване (Таблица 1) изпълняват това условие, но те не са точните стойности.

4.2.2. Минимизация следвайки метода на Mitchell и Myers

Следователно, функцията $\varphi(u_a(x, t))$ (виж уравнение 31) трябва да се стреми към минимум, когато $u_a \rightarrow u$, за цялата област определена от дълбочината на дифузионния слой δ . По-точно, ние може да изискваме да е изпълнено условието

$$\int_0^\delta [\varphi(u_a(x, t))]^2 dx \rightarrow \min, \text{което съвпада с}$$

критерия на Langford [40], вече използван за оценка на интегрални решения, а именно

$$E_L(n, m, t) = \int_0^\delta \left[\frac{\partial u_a}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(a_0 u_a^m \frac{\partial u_a}{\partial x} \right) \right]^2 dx \rightarrow \min \quad (31)$$

4.2.2.1. Зададена температура като гранично условие

Представяйки апроксимирания профил $u = (1-x/\delta)^n$ чрез координата на Zener [41] $\xi = x/\delta$, $0 < \xi < 1$, така че $V(\xi, t) = (1-\xi)^n$ [32,39]. В този случай, дифузионното уравнение (1a), в пространството ξ , приема формата

$$-\frac{d\delta}{dt} \xi \frac{\partial V}{\partial \xi} = a_0 \left[\frac{m}{\delta^2} V^{m-1} \left(\frac{\partial V}{\partial \xi} \right)^2 \right] \quad (32)$$

Тогава, с $\partial V/\partial \xi = -n(1-\xi)^{n-1}$ приближението на функцията

$$\Phi_T(\xi, t) = \delta \frac{d\delta}{dt} \xi n (1-\xi)^{n-1} - a_0 \frac{m}{\delta^2} n^2 (1-\xi)^{n(m+1)-2} \quad (33)$$

Методът развит в [32] използва факта, че за $m = 0$ произведението $\delta(d\delta/dt)$ не

зависи от времето и следователно функцията E_{MT} зависи само от n . Фактът, че $d\delta^2/dt$ не зависи от времето не е нов и е използван от Hamill и Bankoff [42,43] За задачата с фиксирана температура като гранично условие, анализирана в тази глава, това специфично свойство може да се представи във вида $\delta(d\delta/dt)_T \equiv (F_{T(DIM)})^2$. За задачата с зададен поток като гранично условие, както с HBIM така с DIM, получаваме $\delta(d\delta/dt)_q \sim t^{m/(m+2)}$.

Интегрирайки (38) и използвайки решението получено чрез DIM, за задачата Дирихле, получаваме

$$E_{MT(DIM)} = e_{MT(DIM)}(n, m) / \delta^4, \text{ където}$$

$$e_{MT(DIM)}(n, m) = \left[\frac{2n^2}{(2n+1)(2n+2)(2n+3)} - \frac{2}{n(m+1)} - \frac{2}{(2n+nm-2)(2n+nm-1)} \right] +$$

$$+ \frac{m^2}{4n-3} + \frac{1}{2mn+4n-3} + \frac{2m}{2n-1} = 0 \quad (34)$$

Тъй като грешката на апроксимация се представя като отношение $E_{MT} = e_{MT(DIM)} / \delta^4 \equiv e_{MT(DIM)} / t^2$, то тя намалява бързо във времето, то фокусът на минимизационната процедура е върху минимизирането на $e_{MT(DIM)}$ по отношение на n . За да бъдем ясни, приближеният профил (7) генерира изпъкнали разпределения за $n < 1$ и вдлъбнати разпределения за $n > 1$. Следователно резултатите са силно зависими от метода за определяне на експонентата n . В следващите точки са анализирани два подхода.

4.2.2.2. Два подхода за определяне на оптималната експонента n

Подход 1 разглежда числено решение на $E_{MT(HBI)}(n, m) = 0$, като по този начин се намират приближени корени, а след това се определя за коя стойност на n функцията E_{MT} приема минимална стойност. С този подход, ние формално визираме точните решения, независимо от факта, че в резултат на числените решения ние получаваме всъщност приближени стойности. С числените решения на $E_{MT(HBI)}(n, m) = 0$ ние определяме приближено точките където E_{MT} достигат минимуми, защото на практика точни решения не съществуват. След това, чрез оценка на E_{MT} , за тези корени, може да се определи оптималната експоната на профила.

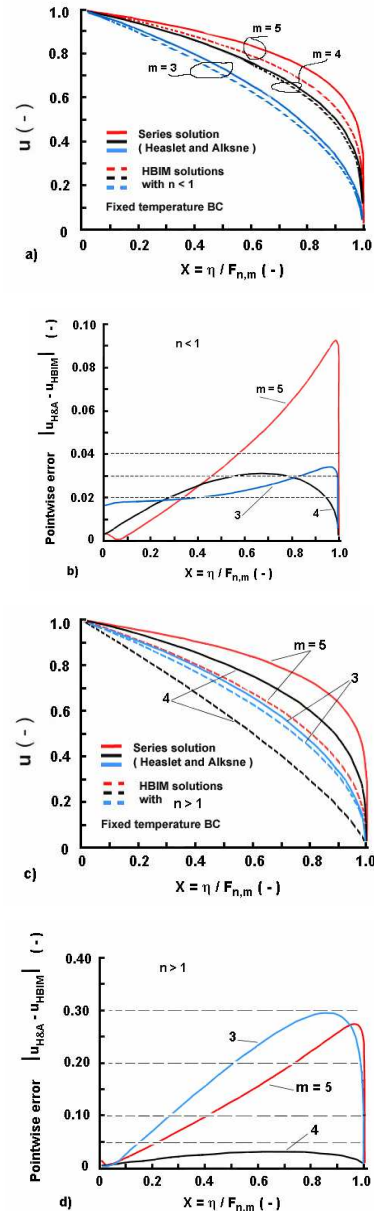
Подход 2 разглежда минимизацията на $E_{MT(HBIM)}(n, m)$, по отношение на n , за зададена стойност на m , в зоната $n > 1$, където кривата $E_{MT(HBIM)}$ затихва плавно, по аналогия с линейното дифузионно уравнение, като по този начин се определя оптималната експонента. От ограниченията наложени на експонентата n следва, че всички тези условия се изпълняват за $n > 1$. Този подход изглежда резонен, защото E_{MT} е мащабирана функция, а освен това той е в съгласие с решенията получени за линейния проблем, когато $m = 0$ [31, 32, 37, 38].

Експонентите определени по двата подхода са представени в Таблица 2, а примери на приближени решения са показани на Фиг. 2a,b. Графиките на Фиг.2a демонстрират силна промяна във формата на профила от вдлъбнат

към изпъкнал, когато оптималната експонента се променя от зоната с $n > 1$ към зоната с $n < 1$ (the plots reveal strong change in the profile shape from concave to convex when the optimal exponent changes from the zone with $n > 1$ towards the zone $n < 1$). За да намерим коректния отговор на въпроса, ще сравним получените приближение решения (Пример 1) с класическото решение (чрез редове) на Heaslet and Alksne [44], както това е направено и в други изследвания, виж –в [2] (Глава 1.1)

Сравнително графично представяне на Фиг.2а и Фиг.2с ясно показва, че вдлъбнатите профили получени на базата на оптимални $n > 1$ (виж Фиг. 3с) са твърде далеч от решенията на Heaslet and Alksne, докато изпъкналите профили получени с $n < 1$ (Фиг.3а) са разположени твърде близко до тях. Освен това, профилите на Фиг.2а показват, че решенията с НВМ с $n < 1$ са по-адекватни (близо до решенията чрез редове), когато стойността на m расте. В допълнение, абсолютните грешки (the pointwise errors) между приближените профили на НВМ и решенията чрез редове поддържат тази гледна точка: профилите генерирани на базата на условието $n < 1$ демонстрират абсолютни грешки по-малки от 4% за разлика от 25–30%, когато оптималните експоненти са определени на базата на условието $n > 1$. Графичното представяне на решенията на Фиг.2 и Фиг.2 използва формата $u(X,t) = (1-X)^n$, където $0 < X = \eta / F_{n,m} < 1$ и $F_{n,m}$ е функцията дефинирана от дълбочината на проникване на дифузанта (зависи от използваната техника на интегриране) във формата $\delta_r(t) = \sqrt{a_0 t} F_{n,m}$;

следователно, всички криви пресичат абсцисата при $X = 1$.



Фиг.2. Безизмерни температурни профили определени на базата на експоната n в две зони : $n < 1$ и $n > 1$

- За $n < 1$. Сравнение с решението чрез редове на Heaslet and Alksne [44] (4 члена от решението)
- За $n < 1$. Абсолютни грешки между НВМ и решението чрез редове [44].
- За $n > 1$. Сравнение на решението чрез редове на Heaslet and Alksne [44] (4 члена от решението);
- Абсолютни грешки между НВМ и решението чрез редове [44].

В решението на Heaslet-Alksne [44] за функцията $F_{n,m}$ се използва символа η_F и тя се изчислява в процеса на решението, така както прави и при интегралния метод. Когато профилите са представени като функция на автомоделната променлива $\eta = x/\sqrt{a_0 t}$, то тогава всички криви пресичат абсцисата в различни точки, защото условието $u = 0$ означава $\eta = F_{n,m}$, а $F_{n,m}$ зависи както от m така и от n_{opt} , както е показано на Фиг.1а и Фиг.3 (следващата точка). Увеличаването на стойността на m редуцира дълбочината на проникване на дифузанта. Този ефект е видим, когато автомоделната променлива η се използва като независима променлива, но кривите стават неразличими, ако профилите са представени като функция на $X = \eta/F_{n,m}$.

Следователно, ние отговорихме на въпроса: *кой от двата метода за определяне на оптималната експонента трябва да се използва? Истинските (физически адекватни) профили съответстващи на модела (1) са изпъкнали и техните приближени решения се получават чрез профила (7) за $n < 1$.*

4.2.2.4. Оптимални експоненти на решения получени чрез DIM

Сега ние накратко ще коментираме резултатите получени чрез **Подход 1** за DIM решения. Следователно, за различни стойности на m в (34) ние можем да решим уравнението $e_{MT(DIM)} = 0$ по отношение на n . Решенията на (33) водят до множество корени, но само

положителните от тях, изпълняващи условието $n > 1/(m+1)$. Оптималните експоненти получени чрез **Подход 1** са представени в Таблица 3, а профилите генерирани с тях са показани на Фиг. 3.

Важно е да се отбележи, че оптималните експоненти определени чрез **Подход 1** са твърде близки до тези получени чрез приравняване на дифузионните дължини. Като едно практическо правило, възникнало в това изследване, може да се каже, че *оптималната експонента е малко по-голяма от тази определена чрез приравняване на дифузионните дълбочини* (the optimal exponent is just greater of that determined by matching method). Стойностите на E_{MT} за експонентите определени чрез метода на приравняване са показани в Таблица 1. Сравнявайки стойностите на E_{MT} в Таблица 1 и Таблица 3, става ясно, че те са от един и същи порядък, и са твърде близки, когато $1 < m < 5$.

4.2.2.5. Зададен поток като гранично условие

В този случай производението $\delta^{1/(m+1)} d\delta/dt$ не зависи от времето, защото отчитайки резултатите (21) и (23) получаваме

• НВІМ

$$\delta_q^{\frac{1}{m+1}} \frac{d\delta_q}{dt} = a_0 \left(\frac{m+1}{m+2} \right) n^{\frac{1}{m+1}} (n+1)^{\frac{1}{m+1}} \quad (35a)$$

За $m=0$ получаваме $n(n+1)$, както беше установено в [32].

$$\delta_q^{\frac{1}{m+1}} \frac{d\delta_q}{dt} = a_0 n^m (n+1)(n+2) \frac{(m+2)}{(m+1)(2m+3)} \quad (35b)$$

Таблица 3. Оптимални експоненти на апроксимиращия профил: решения чрез DIM при зададена температура като гранично условие

	$m = 0$	$m = 0.5$	$m = 1$	$m = 2$	$m = 3$	$m = 4$	$m = 5$
Fixed temperature boundary condition							
Ограничение	$n > 2$	$n > 1$	$n > 0.666$	$n > 0.4$	$n > 0.285$	$n > 0.222$	$n > 0.1818$
n	2.219*	1.35	0.815	0.537	0.305	0.253	0.216 (0.185)
$e_{MT(DIM)}$	-	3.140	2.048	0.759	1.962	5.251	13.809

* определени в [31,32] ;

Таблица 4. Оптимални експонати на апроксимиращия : решения чрез HBIM и DIM .
Зададен поток като гранично условие.

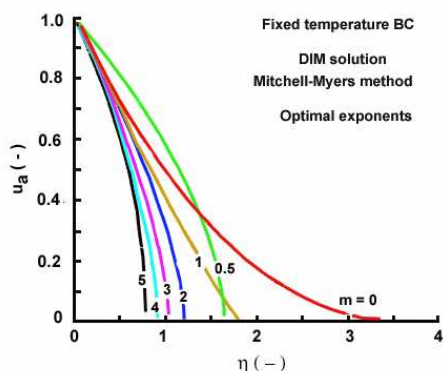
	$m = 0$	$m = 0.5$	$m = 1$	$m = 2$	$m = 3$	$m = 4$	$m = 5$
Ограничение 1	$n > 1$	$n > 0.666$	$n > 0.5$	$n > 0.333$	$n > 0.250$	$n > 0.2$	$n > 0.166$
Ограничение 2	$n > 2$	$n > 1.333$	$n > 1$	$n > 0.666$	$n > 0.5$	$n > 0.4$	$n > 0.333$
HBIM							
n	3.584*	1.333	0.799	0.715	0.3	0.269	0.250
$e_{Mq(HBIM)}$	-	1.503	1.464	20.972	1.338	1.270	1.244
DIM							
	3.822*	1.31	0.87	0.622	0.395	0.260	0.230
$e_{Mq(DIM)}$		3.5876	1.224	2.874	2.679	0.610	1.206

* определени в [31,32] ; Ограничение 1: $n > 1/(m+1)$; Ограничение 2 : $n > 2/(m+1)$

За $m = 0$ имаме

$$\delta^{1/(m+1)} d\delta/dt = [2a_0(n+1)(n+2)]/3, \text{ както е}$$

установено в [32].



Фиг.3. . Безизмерни профили (DIM решение) с оптимални експоненти за различни стойности на параметъра m и зададена температура като гранично условие.

Следователно, средноквадратичните

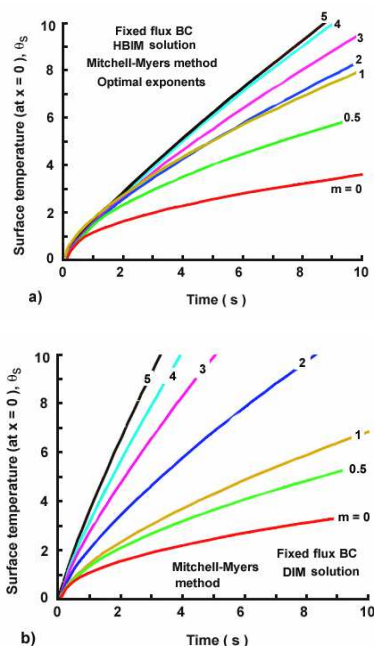
$$\text{грешки } E_{Mq} = \int_0^1 \Phi_q^2(\xi, t) d\xi \text{ са}$$

• DIM

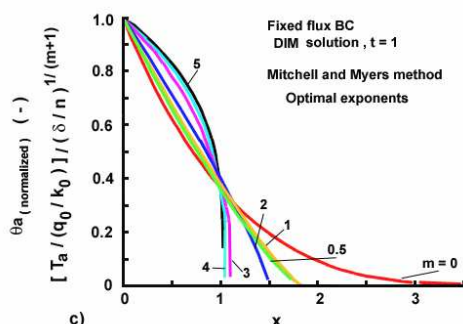
$$E_{Mq(DIM)} = \int_0^1 \left\{ \frac{n^m (n+1)(n+2)(m+2) [(1-\xi)^n + \xi(1-\xi)^{n-1}]}{(m+1)(2m+3)} - \frac{1}{-mn^2(1-\xi)^{2n-2} - n(n-1)(1-\xi)^{n-2}} \right\}^2 d\xi \quad (42)$$

Задавайки различни стойности на $m > 0$ в (43) и (44), и прилагайки двата подхода коментирани в предишната точка, ние можем да определим оптималните експоненти (виж Таблица 4). Профили на повърхностната температура, генерирана чрез тези оптимални експоненти, са показани на Фиг.4 и Фиг. 5. Нормализираните температурни профили на Фиг. Fig.5b,c ясно показват ретардацията в резултат на нарастване на нелинейността при увеличаване на стойността на параметъра m . Решенията получени чрез HBIM са практически

независимо от факта, че е налице ретардацията с нарастването на m : виж Фиг.6а с профилите генерирани с уравнение (23) и Фиг.6b с нормализираните профили; отношението

$$\left[\theta_a / (\delta/n)^{1/m+1} \right] = \left[T_a / (q_0/k_0) (\delta/n)^{1/m+1} \right].$$


Фиг.4. Зададен поток като гранично условие: Повърхностна температура като функция на времето
а) Решение чрез HBIM и оптимални експоненти определени чрез техниката на Mitchell and Myers.
б) Решение чрез DIM и оптимални експоненти определени чрез техниката на Mitchell and Myers.



Фиг.5. Зададен поток като гранично условие: решения чрез HBIM и DIM.
Безизмерни (нормализирани) температурни профили за решение на DIM и определени при $t = 1$.

Температурните профили (нормализирани) с оптимални експоненти определени чрез DIM са показани на Фиг. 5. Ясно се вижда ефекта на ретардацията в резултат на нелинейността, при нарастване на стойността на m .

5. СРАВНЕНИЕ НА ИНТЕГРАЛНИТЕ РЕШЕНИЯ

(Benchmarking the integral-balance solutions)

За да удостоверим точността на получените приближени решения е необходимо да ги сравним с подобни известни от литературата. Не съществуват точни аналитични решения на модела (1) (*no closed form solutions to the model (1) are available*) [45,46]. Първото приближено решение на Philip [47] е хибридно по своя характер, чрез първоначална аналитична стъпка и числени решения след това (виж детайли в книгата на Crank [45]).

Сега, ние ще сравним нашите приближени решения (the approximate closed form solutions) с тези известни от литературата.

5.1. Зададена температура като гранично условие

Повечето от решенията [44,45,46,47,48,49,50,51] дефинират в самото начало (правят така наречения *ansatz*, т.е. допускане) Болцмановата променлива $\eta = x/t_*^{1/2}$, където t_* е хоризонтална координата, т.е. в термини използвани в настоящата глава, това е $t_* = D_0 t$. Тази стъпка е много удобна за сравнение на резултати получени в различни изследвания, защото интегралните решения също дефинират, директно чрез решението, променливата η .

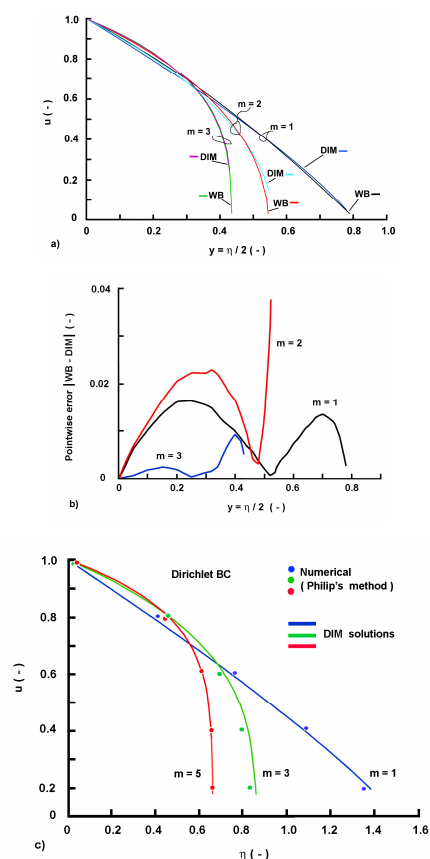
5.1.1. Сравнение с решението на Philip

Weisberg and Blanc [48] провеждат експериментални изследвания за дифузия на цинк в GaAs и решават модела (1), използвайки метода на [47]. Числените резултати на Weisberg and Blanc са сравнени с решението получено чрез DIM на Фиг. 6а, и демонстрират много добро съвпадение. Абсолютните грешки са в границите $0 - 0.02$ (виж Фиг.6б). Рязкото нарастване на кривата за $m = 2$ (Фиг.6б) съответствува на секцията в близост до фронта на дифузионния слой (close to the edge of the penetration front). Чрез решението получено с DIM се получават по-големи дълбочини на проникване в сравнение с числените резултати. В допълнение, данните получени чрез използване на същия метод, и публикувани в [51], са показани на Фиг.6с, демонстрирайки много добро съвпадение с резултатите на DIM. Като общо поведение на решенията, може да се отбележи, че с нарастване на стойността на m , абсолютните грешки между решението на DIM и числените резултати намаляват, и ние можем да видим тази тенденция в сравнителните изследвания представени по-долу.

5.1.1. Сравнение с решението чрез редове на Heaslet and Alksne [44]

Това е общоприета сравнителна процедура (сравнение с решението чрез редове на Heaslet and Alksne [44]) за тестване на нови решения на модела (1), както е показано в [49,50,51]. В контекста на анализа проведен в това изследване, решението чрез редове също използва идеята за крайна дълбочина на проникване на дифузанта: използвайки редове от нормализираната променлива $X = \eta/\eta_F$,

където при интегралните решения η_F съответствува на функцията $F_{n,m}$. Графичното сравнение на решенията чрез DIM и тези на Heaslet-Alksne [44] е показано на Фиг. 8а,с. Абсолютните грешки (Фиг. 8б и Фиг.8д) ясно показват, че грешките на апроксимация, като правило, са най-големи в близост до фронта на слоя, т.е. до фронта на профила. Фигура 8е показва абсолютните грешки за случаи на две експоненти, когато имаме $m = 5$, и потвърждават, че за $n = 0.185$ се получават най-добри резултати. Случаят за $m = 0.5$ е показан на Фиг. 8е.



Фиг.6. Сравнение на DIM решения с числените резултати на Weisberg and Blanc [48]

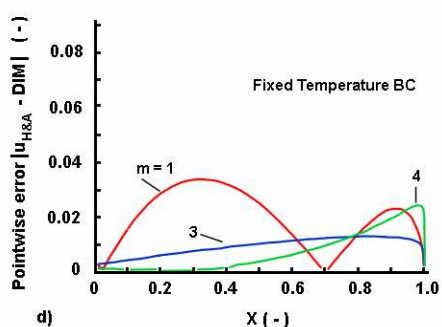
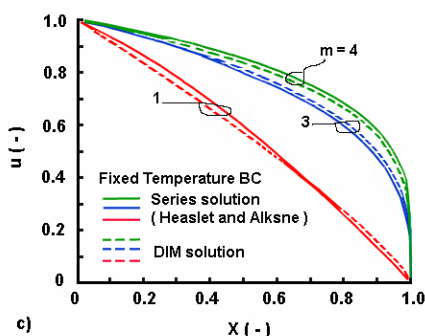
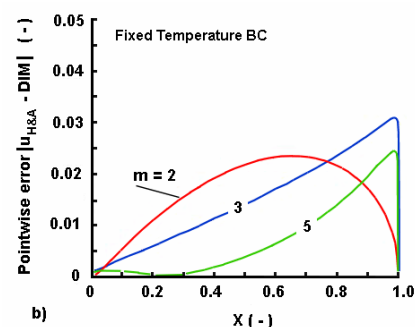
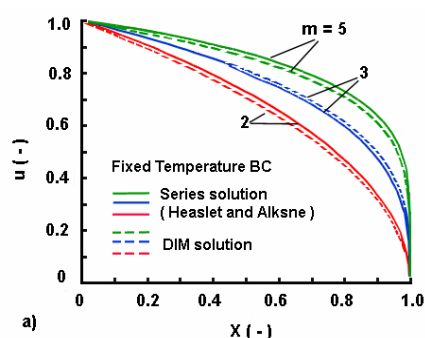
Числените данни са взети от Таблица 1 на [48].

а) Профили при $m=1$, $m=2$ и $m=3$

Графиките на абсолютните грешки съответствуват на профилите представени на фиг. 7а

5.1.2. Сравнение с решението чрез редове на Brutsaert and Weisman [1970]

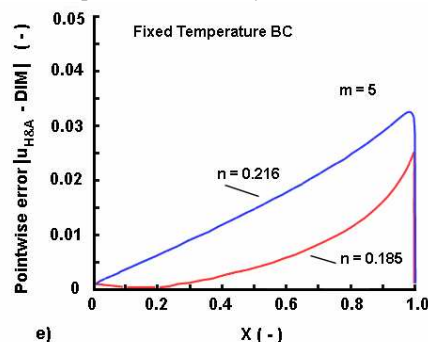
С въвеждане на Болцмановата променлива $\eta = x/t_*^{1/2}$ моделното уравнение (1a) се свежда до обикновено диференциално



Фиг. 7. Сравнение на решения чрез DIM (с оптимални експоненти) и решенията на Heaslet and Alksne [44] (4 члена от решението) :

- Решения за $m=2$, $m=3$ и $m=5$
- Абсолютни грешки съответстващи на случаите с $m=2$, $m=3$ и $m=5$.
- Решения за $m=1$, $m=3$ и $m=4$
- Абсолютни грешки съответстващи на случаите с $m=1$, $m=3$ и $m=4$

Абсолютни грешки съответстващи на $m=5$



$$\frac{d^2}{d\eta^2} \left[\frac{S^{m+1}}{m+1} \right] + \frac{\eta}{2} \frac{dS}{d\eta} = 0 \quad (43)$$

с трансформирани гранични условия: $S=0$ за $\eta \rightarrow \infty$ и $S=1$ за $\eta=0$. Ние използваме символа S за да различаваме решението (43) от полученото в тази глава, където за същата променлива се използва символа u .

Brutsaert и Weisman [49,50] са анализирали грешката на апроксимация между численото решение на Philip [47], решението на Heaslet-Alksne [44] и тяхното решение. Първата апроксимация получена в близост до $S=1$ (т.е. когато $\eta \rightarrow 0$) е [49]

$$S_1 = \left\{ 1 - \eta \left[\frac{(m+1)^2}{2(m+2)} \right]^{\frac{1}{2}} \right\}^{\frac{1}{m+1}} \quad (44)$$

Втората апроксимация е получена за околността на фронта на дифузионния слой, когато $\eta \rightarrow \eta_B = \delta$, което съответства на $S=0$, и уравнението си свежда до (43)

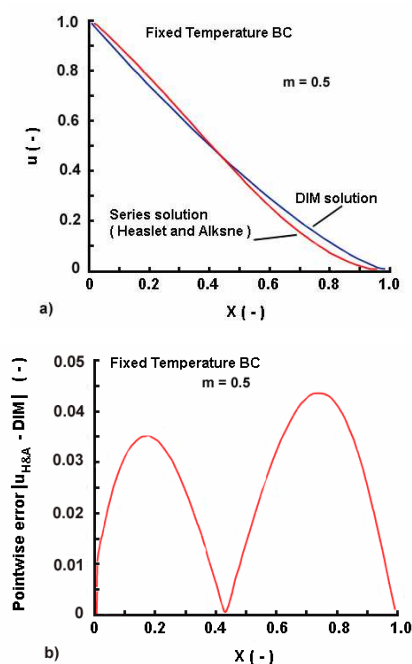
$$\frac{d^2}{d\eta^2} \left[\frac{S^{m+1}}{m+1} \right] + \frac{\eta_F}{2} \frac{dS}{d\eta} = 0, \text{ с } S = S^m \frac{dS}{d\eta} = 0,$$

$$\text{за } \eta > \eta_B \quad (45a,b)$$

Условието (45,b) е еквивалентно на условието на Гудман. В този случай, критичната точка (дълбочината на проникване) е $\eta_B = (2/m)^{1/2}$ и приближеното решение е

$$S_0 = \left(1 - \eta \sqrt{\frac{m}{2}} \right)^{\frac{1}{m}} \quad (46)$$

Това решение съвпада с първият член на решението на Heaslet-Alksne [44].

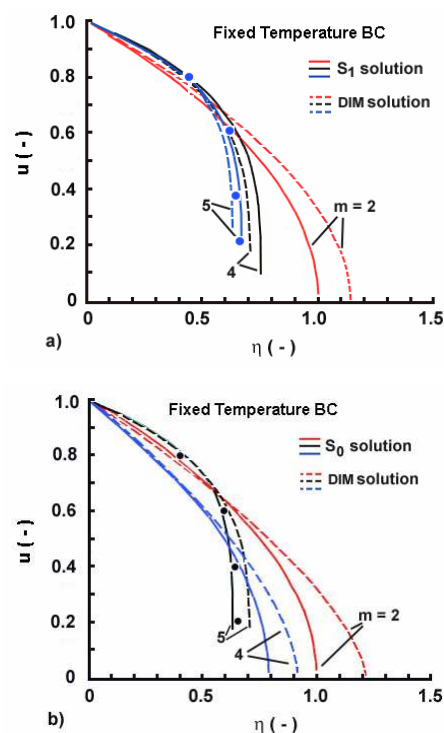


Фиг.7. Сравнение на решения чрез за $m = 0.5$ и решението на Heaslet and Alksne [44] (3 члена от редицата). а) Температурни профили .b) Абсолютни грешки

Фигура 9 представя решението чрез DIM и апроксимацията S_1 на Brutsaert-Weisman [51] за различни стойности на параметъра m и числени стойности получени чрез метода на Philip [47]. Абсолютните грешки на апроксимация (Фиг.9b) са приемливи за промени на променливата η в границите

$0 < \eta < 0.5$ съответстващи на $0.6 < u < 1$.

Решението S_0 генерира разпределения, които качествено са като тези получени чрез DIM (Фиг.10a). Независимо от това, обаче, графиките (Фиг.10a,b) ясно показват, че разликите между двете решения могат да достигнат 0.05 при промяна от $\eta = 0$ до $\eta \approx 0.5$: диапазон съответстващ на $0.75 < u < 1$. Най-общо казано, разликите между решението получено чрез DIM и апроксимацията S_0 (и S_1) намаляват с нарастване на стойността на m (виж Фиг.9b и Фиг.10b). Това потвърждава резултатите на Brutsaert-Weisman [49], където техните решения са сравнени с числените резултати на Philip [47]. В графиката на грешките, различните нива са маркирани с пунктирани линии, така че е лесно да видят границите на използване на решението чрез DIM, когато точността на апроксимация е предетерминирана.

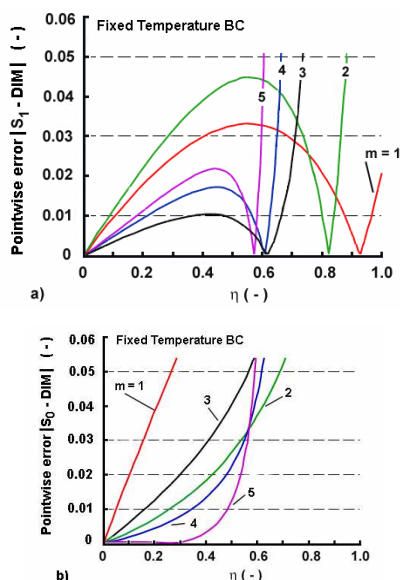


Фиг.9. Сравнение на DIM решения с апроксимация

S_1 и S_0 на Brutsaert and Weisman [49]. Точките са за $m = 5$, изчислени чрез числения метод на Philip [47] и взети от Таблица 1 на [49]

a) DIM решение и S_1 апроксимация

b) DIM решение и S_0 апроксимация



Фиг.10. Сравнение на DIM решения с апроксимация S_1 и S_0 на Brutsaert and Weisman [49].

a) Абсолютни грешки между DIM и апроксимация S_1

b) Абсолютни грешки между DIM и апроксимация S_0

5.1.3. Сравнение с приближеното решение на Tuck [52]

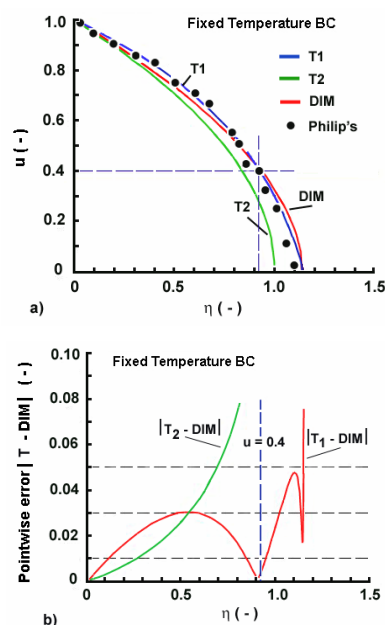
Tuck [52] получава приближено решение за случая на $m = 2$ чрез апроксимации на дифузионния профил в две зони, означени като T1 и T2, а именно :

$$T1: \eta = \frac{x}{\sqrt{D_0 T}} = \frac{(e^2 - e^{2u})}{\sqrt{30.99}}, \quad 0.4 < u < 1 \quad (47)$$

$$T2: \eta = \frac{x}{\sqrt{D_0 T}} = 1 - u^2, \quad 0 < u < 0.4 \quad (48)$$

Графичното представяне на тези апроксимации заедно с решението чрез DIM, за $m = 2$ е направено на Фиг.11а. Абсолютните грешки (Фиг.11b) ясно показват, че разликата

между T1 и DIM е по-малка от 0.03 в границите $0.4 < u < 1$, съответстващи на $0 < \eta < 0.923$. С втората апроксимация (T2), абсолютната грешка може да достигне до около 0.05 в диапазона $0 < \eta < 0.5$. Извън тези граници абсолютната грешка нараства драстично. В резюме, решението чрез DIM за $m = 2$ демонстрира приемлива абсолютна грешка на апроксимация, по-малка от 0.03, по отношение на решението T1, в границите $0 < \eta < 0.923$.



Фиг.11. Сравнение на DIM решение за $m = 2$ и апроксимацията на Tuck [52]

a) Приблизени профили

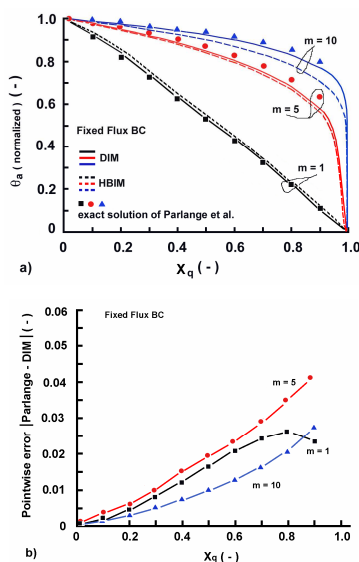
b) Абсолютни грешки

5.3. Зададен поток като гранично условие

5.3.1. Сравнение с числените решения на Parlange et al. [53]

Решенията получени чрез HBIM и DIM са сравнени на Фиг. 13а с числените решения на Parlange et al. [53], с използване на интегрирания метод на Shampine [54], като профилите са нормализирани. За големи стойности на m , решенията на HBIM и DIM се

схождат към референтните решения. За случая, когато $m=10$ бяха установена оптимални експоненти: $n_{HBIM}(10) \approx 0.180$ и $n_{DIM}(10) \approx 0.115$. Кривите на абсолютните грешки, представени на Фиг. 13b, ясно сочат, че само за $m=5$, разликата между интегралното решение на DIM и референтното числено решение нарастват силно само в края на нормализирания интервал. При малки стойности на m порядъкът на грешките е близък до този демонстриран от решенията за зададена температура като гранично условие. Общо казано, нарастването на грешката в близост до фронта на дифузионния слой е вътрешно присъщо качество на интегралните методи [26, 31,32,33,34, 38], както и на други приближени методи коментирани в предишната точка 5.2.



Фиг.12. Зададен поток като гранично условие. Сравнение на DIM решение с доминото (числено) решение на Parlange et al. [53]. Точките са стойности взети от Таблица 3 на [53].

- Приближени профили за три различни стойности на параметъра m .
- Абсолютни грешки

5.3.2. Сравнение с моментното решение на Prasad and Salomon

Prasad and Solomon [2] решават моделното уравнение (1) чрез метод на моментите, използвайки класическия подход [57], където решението се представя във вида

$$\theta = \delta^\alpha (1-X)^\alpha \sum_{k=0}^K A_k \delta^k (1-X)^k = \delta^{\frac{1}{m+1}} \sum_{k=0}^K a_k \delta^k (1-X)^{k+\alpha}, \quad \alpha = \frac{1}{m} \quad (49a,b,c)$$

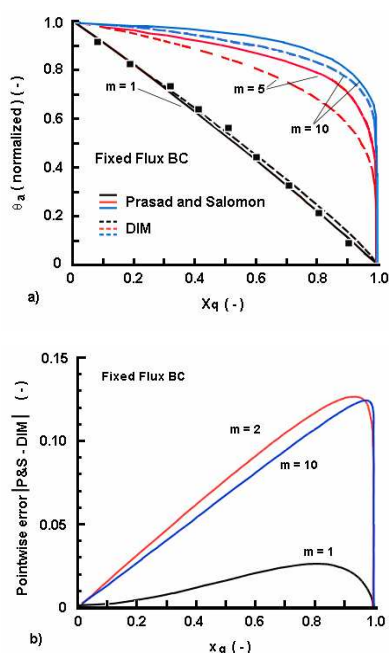
Тук дълбочината на проникване се дефинира като

$$\delta = \left[\left(\frac{m+2}{m+1} \right) \left(\frac{1}{m} \right) a_0^m \right]^{\frac{m+1}{m+2}} t^{\frac{m+1}{m+2}}, \quad a_0 = 1.20263 \quad (50b)$$

Важно е да се отбележи, че в случай на зададен поток като гранично условие, както решението (50), така и това получено чрез DIM дефинират безизмерната променлива $\eta_q = x / (a_0 t)^{\frac{m+1}{m+2}}$. Следователно нормализираната абсциса, следвайки решението на DIM, е $X_q = \eta_q / F_{q(n,m)}$, където функцията $F_{q(n,m)}$ се дефинира от уравнение (27).

Интегралното решение чрез DIM и профилите на Prasad and Salomon [2] са представени на Фиг. 12a. За големи стойности на m , поведението е същото като това показано на Фиг.12a. Абсолютните грешки представени на Фиг. 13b сочат, че съществуват значителни разлики между решенията на DIM и тези на моментния метод, независимо от факта, че и двата метода са приближени и принадлежат на семейството на метода с претеглени остатъци (the weighted residuals method) [57]. Още повече, количествените измервания на грешки при

използване на моментния метод, сравнявайки го с много по-точното числено решение на Parlange et al. [53], не се дискутира в [2], а симулациите са проведени чрез промяна на броя на членовете в редиците (49). Гледайки на решенията получени чрез DIM е важно да се види, че максималната грешка на апроксимация (виж Фиг.11b), спрямо численото решение, не надвишава 3–4% .



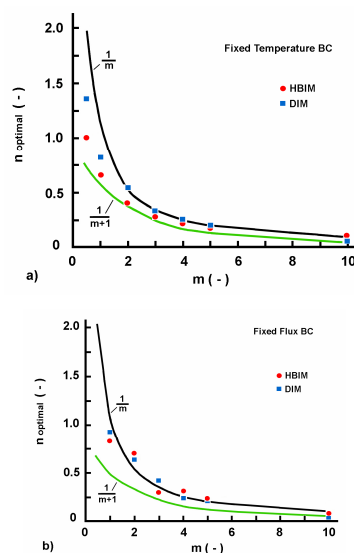
Фиг.13. Зададен поток като гранично условие. Сравнение на DIM решение с моментния метод (3 члена) на Prasad and Salomon (P&S) [2]

- Приблизени профили генерирани чрез двете приближени решения за 3 различни стойности на параметъра m както е направено на **Фиг. 12a**.
- Абсолютни грешки между DIM решения и моментния метод (3 члена) на Prasad and Salomon (P&S).

5.4. Правилото на експонентите (The law of the optimized exponents)

Чисто аналитичните изследвания [44, 51,55,56] показват, че решението може да се апроксимира с един член $(1-x/\delta)^n$, където $n=1/m$. В настоящото изследване това е

демонстрирано чрез приближеното решение S_0 на Brutsaert-Weisman [49] и моментния метод на Prasad-Salomon [2]. Още повече, ограничението, което трябва да изпълняват експонентите на апроксимиращия профил на границите на дифузионния слой е $n \sim 1/(m+1)$. Следователно, въпросът е: *Дали оптималните експоненти демонстрират същото поведение?* Експонентите определени в тази глава са сравнени на Фиг. 15a и Фиг.15b с теоретичната крива $n=1/m$ и допълнителното условие $n=1/(m+1)$ наложено при $x=0$.



Фиг.14. Правила за поведението на оптималните експоненти.

- Зададена температура като гранично условие
- Зададен поток като гранично условие

Двете графични представяния потвърждават теоретичната зависимост $n=1/m$, но с изключение на стойностите свързани със задачата при зададен поток като гранично условие и определени чрез метода на сравнение на дължините на дифузионния слой. За случая на зададена температура като гранично условие, с увеличаване на m оптималните експоненти се сходят към

профила $n = 1/m$, но за $m < 3$ те са по-близо до кривата $n = 1/(m+1)$. Когато задачата е със зададен поток като гранично условие, обаче, експонентите строго следват (strongly converge to) зависимостта $n = 1/m$. Още повече, и за двете задачи, с нарастване на m , експонентите се разполагат в се по-тясна област, както се вижда от Таблица 3 и Таблица 4, а също и от почти плоската опашка на функцията $n = 1/m$ за големи стойности на m .

Следователно, оптималните експоненти определени чрез прилагане на критерия на Langford [40] и техниката на Mitchell-Myers [32, 39] следват теоретичната крива $n = 1/m$ с някои малки отклонения при $m < 3$ (задача на Дирихле).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Hill, J.M., Similarity solutions for nonlinear diffusion- a new integration procedure, *J. Eng. Math*, 23 (1989) pp. 141-155
- [2] Prasad, S.N., Salomon J.B., A new method for analytical solution of a degenerate diffusion equation, *Adv. Water Research*, 28 (2005), pp. 1091-1101
- [3] Smyth, N.F., Hill, J.M., High-Order Nonlinear Diffusion, *IMA J Appl Math*, 40 (1988), pp.73-86
- [4] Zel'dovich, Y.B., Kompaneets, A. S., On the theory of heat propagation for temperature dependent thermal conductivity. In: Collection Commemorating the 70th Anniversary of A. F. Joffe, *Izv. Akad. Nauk SSSR*, Moscow, (1950) pp 61–71 .
- [5] Buckmaster, J., Viscous sheets advancing over dry beds, *J Fluid Mech*, 81(1977), pp. 735–756
- [6] Marino, B.M., Thomas, L. P., Gratton, R., Diez, J.A., Betelu, S., Waiting-time solutions of a nonlinear diffusion equation: Experimental study of a creeping flow near a waiting front. *Physical Review E*, 54 (1996), pp. 2628-2636
- [7] Lonngren, K.E., Ames, W.F., Hirose, A., Thomas, J., Field penetration into plasma with nonlinear conductivity. *The Physics of Fluids*, 17(1974), pp. 1919-1920
- [8] Khan, Z.H., Gu, I. R., Khan, W.A., Effect of variable thermal conductivity on heat transfer from a hollow sphere with heat generation using homotopy perturbation method, In Proc. ASME Summer Heat Transfer Conf, 2008, August 1-14, 2008, (2008), Article HT2008-56448, Jacksonville, Florida, USA.
- [9] Pattle, R.E., Diffusion from an instantaneous point source with concentration-dependent coefficient,. *Quart J Mech Appl Math*, 12(1959), pp. 407-409
- [10] Muskat, M.. *The Flow of Homogeneous Fluids through Porous Media*, McGraw-Hill, New York (1937).
- [11] Peletier, L.A., Asymptotic behavior of solutions of the porous media equations, *SIAM J Appl Math*, 21 (1971), pp. 542-551
- [12] Aronson, D.G., The porous medium equation. In: *Nonlinear Diffusion Problems*, Lecture Notes in Math. 1224, A. Fasano and M. Primicerio, eds., Springer, Berlin, (1986), pp 1–46
- [13] King, J.R., The isolation oxidation of silicon: The reaction-controlled case, *SIAM J Appl. Math*, 49 (1989), pp. 1064–1080
- [14] Lacey, A.A., Ockendon, J.R., Tayler, A.B. Waiting-time solutions of a nonlinear diffusion equation, *SIAM J Appl Math*, 42 (1982), pp.1252-1264
- [15] Atkinson, C., Reuter, G.E.H., Ridler-Rowe, C.J., Traveling wave solutions for some nonlinear diffusion equations, *SIAM J Appl Math*, 12 (1981), pp. 880- 892
- [16] Strunin, D.V., Attractors in confined source problems for coupled nonlinear diffusion, *SIAM J Appl Math*, 67(2007), pp.1654–1674
- [17] Nasser, M., Daneshbod, Y., Pirouz, M.D., Rakhshandehroo, Gh.R., Shirzad, A. , New analytical solution to water content simulation in porous media, *J Irrigation and Drainage Eng*, 138 (2012), pp. 328-335.
- [18] Hill, D.L., Hill, J.M. , Similarity solutions for nonlinear diffusion-further exact solutions. *J Eng Math*, 24 (1990), pp. 109-124
- [19] Hill, J.M., Hill, D.L. ,On the derivation of first integrals for similarity solutions, *J Eng Math*, 25 (1991), pp.287-299
- [20] Tomatis, D. Heat Conduction in nuclear fuel by the Kirchhoff transformation, *Ann Nucl Energy*, 57(2013), pp.100-105
- [21] Knight, J.H., Philip, J.R., Exact solutions in nonlinear diffusion, *J Eng Math*, 8 (1974), pp.219-227
- [22] Kolpakov, V.A., Novomelski, D.N., Novozhenin, M.P. , Determination of the surface temperature of sample in region of its interaction with a nonelectrode plasma flow using the Kirchhoff transformation of a quadratic function, *Technical Physics*, 58 (2013), pp.1554-1557
- [23] King, J.R. Integral results for nonlinear diffusion equations, *J Eng Math*, 25 (1991), pp.191-205.
- [24] Paripour, M., Babolian, E., Saeidian, J. Analytic solutions to diffusion equations, *Math Comp Model*, 51 (2010), pp. 649-657
- [25] Walker, G.G., Scott, E.P., Evaluation of estimation methods for high unsteady heat

- fluxes from surface measurements, *J Thermophysics Heat Transfer*, 12 (1998), pp.543-551
- [26] Goodman, T.R., Application of Integral Methods to Transient Nonlinear Heat Transfer. In: *Advances in Heat Transfer*, T. F. Irvine and J. P. Hartnett, eds., 1 (1964), pp.51-122 Academic Press, San Diego, CA
- [27] Hristov, J. An approximate analytical (integral-balance) solution to a nonlinear heat diffusion equation. *Thermal Science*, 19(2) (2015), pp. 723-733
- [28] Roday, A.P., Kazmierczak, M. J., Analysis of phase-change in finite slabs subjected to convective boundary conditions: Part I – Melting, *Int Rev Chem Eng*, 1 (2009), pp.87-99
- [29] Roday, A.P., Kazmierczak, M. J., Analysis of phase-change in finite slabs subjected to convective boundary conditions: Part II – Freezing, *Int Rev Chem Eng*, 1 (2009), pp.100-108
- [30] Volkov, V.N., Li-Orlov, V.K., A Refinement of the Integral Method in Solving the Heat Conduction Equation, *Heat Transfer Sov Res* 2 (1970), pp. 41-47
- [31] Myers, J.G., Optimizing the exponent in the heat balance and refined integral methods, *Int Comm Heat Mass Transfer*, 36 (2009), pp.143-147
- [32] Mitchell, S. L., Myers, T. G., Application of standard and refined heat balance integral methods to one-dimensional Stefan problems, *SIAM Review*, 52 (2010), pp. 57-86
- [33] Hristov, J., The heat-balance integral method by a parabolic profile with unspecified exponent: Analysis and Benchmark Exercises, *Thermal Science*, 13 (2009), pp. 27-48
- [34] Hristov, J., The Heat-Balance Integral: 1. How to Calibrate the Parabolic Profile? *Comptes Rendues Mechanique*, 340 (2012), pp. 485-492
- [35] Sadighi, A., Ganji, D.D., Exact solutions of nonlinear diffusion equations by variational iteration method, *Comp. Math Appl.*, 54 (2007), pp.1112-1121
- [36] Hill, D.L., Hill, J.M., Similarity solutions for nonlinear diffusion-further exact solutions, *J Eng Math*, 24 (1990), pp.109-124.
- [37] Mitchell, S.L., Myers, T.G., A heat balance integral method for one-dimensional finite ablation, *AIAA J. Thermophys* 22 (2008), pp. 508-514
- [38] Hristov, J., The Heat-Balance Integral: 2. A Parabolic profile with a variable exponent: the concept and numerical experiments, *Comptes Rendues Mechanique*, 340 (2012), pp.493-500
- [39] Mitchell, S., Myers, T.G., Application of the heat balance integral methods to one-dimensional phase change problems, *Int. J. Diff. Eqs.* Volume 2012, (2012) Article ID 187902, doi: 10.1155/2012/187902.
- [40] Langford ,D. ,The heat balance integral method, *Int J Heat Mass Transfer*, 16 (1973), pp. 2424-2428
- [41] Zener, C., Theory of growth of spherical precipitates from solid solutions. *J Appl Phys.*, 20 (1949), pp. 950-953
- [42] Hamill, T.D., Bankoff, S.G., Maximum and minimum bounds on the freezing-melting rates with time-dependent boundary conditions, *AIChE J*, 9 (1963), pp. 741-744
- [43] Hamill, T.D., Bankoff, S.G., Similarity solutions of the plane melting problem with temperature-dependent thermal properties, *Ind Eng Chem Fund*, 3 (1964), pp.177-179
- [44] Heaslet, M.A., Alksne, A., Diffusion from a fixed surface with a concentration-dependent coefficient, *J. Soc. Ind. Appl. Math.*, 9 (1964), pp.463-479.
- [45] Crank, J. *The Mathematics of Diffusion*, Oxford Ppress, London, (1956).
- [46] King, J.R., Approximate solutions to a nonlinear diffusion equation, *J. Eng. Math.*, 22 (1988), pp. 53-72.
- [47] Philip, J.R., Numerical solution of equations of the diffusion type with diffusivity concentration-dependent, *Faraday Soc. Trans.*, 51(1955), pp. 885-892.
- [48] Weisberg, L.R., Blanc, J., Diffusion with interstitial-substitution equilibrium. Zinc in GaAs, *Phys. Rev.*, 11(1963), pp.1548-1552.
- [49] Brutsaert ,W., Weisman, R.N. The adaptability of an exact solution to horizontal infiltration, *Water Resour. Res.*, 4 (1968), pp.785-789.
- [50] Brutsaert ,W., Weisman, R.N., A solution for vertical infiltration into dry porous media, *Water Resour. Res.*, 4 (1968), pp. 1031-1038.
- [51] Brutsaert, W., Weisman, R.N. Comparison of solutions of anon-linear diffusion equation, *Water Resour. Res.* 6 (1970), pp. 642-644.
- [52] Tuck, B., Some explicit solutions to the non-linear diffusion equation, *J.Phys. D:Appl. Phys.*, 9 (1976), pp. 1559-1569
- [53] Parlange, J-Y, Hogarth, W.L., Parlange, M.B., Haverkamp, R., Barry, D.A., Ross, P.J., Steenhuis, T.S., Approximate analytical solution of the nonlinear diffusion equation for arbitrary boundary conditions, *Transport Porous Med*, 30 (1998), pp. 45-55.
- [54] Shampine, L.F., Some singular concentration-dependent diffusion problems, *ZAMM*, 53 (1973), pp.421-422.
- [55] Philip, J.R., Nonlinear diffusion with nonlinear loss, *ZAMP*, 45(1994), pp. 387-398.
- [56] Philip, J.R., Nonlinear diffusion with loss or gain, *J. Austral. Math. Soc. Ser B*, 41 (2000), pp. 281-300.
- [57] Ames, W.F. *Nonlinear partial differential equation in engineering*, Academic Press N.Y. (1965)

ГЛАВА 1.3

НЕСТАЦИОНАРНА ТОПЛОПРОВОДНОСТ С КОЕФИЦИЕНТ НА ТОПЛИННА* ДИФУЗИЯ ЛИНЕЙНО ЗАВИСЕЩ ОТ ТЕМПЕРАТУРАТА: Интегрален метод

Тази глава представя приближени аналитични решения на нестационарна топлопроводност с коефициент на топлинна дифузия линейно зависещ от температурата и използване на метода на интегралния топлинен баланс. Решенията са получени чрез подобрен директен метод, при които се избягва първоначална линеаризация на моделното уравнение чрез трансформацията на Кирхоф. Основните стъпки на новите решения са насочени към подобряване на интегриращите техники и оптимизация на експонентата на апроксимиращия параболичен профил с недефинирана експонента. Решения на задачите на Дирихле и Нюман са развити като примери, използвайки класическият метод на топлинен интегрален баланс (Heat-balance Integral method, HBIM) и метод с двойно интегриране (Double-integration method, DIM). Развити са два допълнителни примера с използване на HBIM и DIM в случай на трансформация на Кирхоф.

1. ВЪВЕДЕНИЕ

Повечето от дифузионните модели на пренос на топлина (или маса) са нелинейни. Само в някои редки случаи, *съществуват точни аналитични решения*, и като правило се използват числени методи. Въпреки това, в някои случаи е възможно да се получат приближени аналитични решения. Тази глава (и поддържащата я статия) представя нови решения на нестационарна нелинейна топлопроводност чрез метода на топлинния интегрален баланс (Heat-balance Integral method,

HBIM) [1] и метода с двойно интегриране (Double-integration method, DIM) [2,3].

1.1. Формулиране на основната задача

Изследването представено тук разглежда нестационарна топлопроводност, в полубезкрайна среда, с коефициент на топлинна дифузия зависещ от температурата и моделирана чрез уравнения (1a-1c)

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (1a)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(a(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (1b)$$

$$a(T) = a_0 (1 + \beta T) \quad (1c)$$

Уравнение (1b) и функционалната зависимост (1c) са свързани преди всичко със зависимия от температурата коефициент на топлопроводност $k = k_0 (1 + \beta T)$, ако произведението ρC_p не зависи от температурата [4,5,6,7].

Трудностите при решаване на този клас от задачи са мотивирали различни методи, както точни, така и приближени [5, 6,7,9,10,11,12,13,14,15,16,17]. Трансформацията

на Кирхоф [18] $w = \int_0^T a_0 (1 + \beta T) dT$ е най-често

срещания подход за трансформиране на уравнение (1c) в линейно дифузионно уравнение, което при използване на (2a) води до

$$\frac{\partial w}{\partial t} = a_0 \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \quad (2)$$

След това, решението на (2) може да бъде получено чрез редове [4], разделяне на променливите [19,20], хомотопия и пертурбация [22], и други методи. Най-накрая, решението изразено чрез зависимата променлива T може да се получи аналитично [4] чрез метода на инвертиране на редове (the

* Публикувано като: Antoine Fabre, Jordan Hristov, On the integral-balance approach to the transient heat conduction with linearly temperature-dependent thermal diffusivity, *Heat Mass Transfer*, January 2017, Volume 53, Issue 1, pp 177–204, DOI: 10.1007/s00231-016-1806-5

series reversion method) [21] или чрез числени методи [22].

Методът на интегралния баланс е сред приближените аналитични методи позволяващ да се получат аналитични решение в затворена форма (closed-form solutions) на задачата представено чрез модела (1c), но неговата най-проста форма, позната метод на топлинния интеграл (*Heat-balance integral method*) [1], е използвана много рядко и спорадично [1, 23] за решаване на задачата представено чрез (1b), по-точно когато коефициента на топлинна дифузия е зависим от температурата чрез зависимостта (1c). Основният подход в тези решения е използването на нелинейна трансформация

$$v = \int_0^T \rho C_p dT \quad \text{за да се линеаризира уравнение}$$

(1b), а след това да се приложи НВІМ с апроксимиращ кубичен полиномиален профил. Важно е да се отбележи, че в тези решения [1, 23] нелинейната трансформация се прилага само за повърхностната температура (при $x=0$). Тези решения не са много известни и широко прилагани поради вътрешно присъщото качество на НВІМ да се предетерминира точността на апроксимация, когато предварително се дефинира порядъка на апроксимиращия профил [1,3].

Последните резултати с използване на простата форма метода (НВІМ) [24] (Глава 1.1) и при прилагане на метода с двойно интегриране (DІМ) [25] (Глава 1.2) за модела (1b), при степенна зависимост на коефициента на топлинна дифузия $a = a_0 T^m$, показват една нова стратегия, при която нелинейната трансформация на Кирхоф може да се избегне.

Настоящата глава представя нови решения на модела (1b) с адитивна

функционална зависимост (1c) на коефициента на топлинна дифузия от температурата: използват се техниките на НВІМ и DІМ и стратегия на решенията представена в [25] (Глава 1.2).

Представени са решения на задача на Дирихле и задача на Нюман с използване на обобщен параболичен профил с недефинирана експонента [26-29]. Във всички случаи, числени решения (използвайки метода на крайните разлики и метода на Runge-Kutta от 4-ти порядък, които са вградени в Maple (виж Допълнение А за детайли) са използвани като референтни решения, за оценка на точността на получените приближени аналитични решения.

2. СТРАТЕГИИ ЗА РЕШЕНИЕ

Стратегията прилагане за решение на нелинейния проблем се основава на резултатите от Глава 1.1 и Глава 1.2, при използване на линейната зависимост (1c) и апроксимиращ параболичен профил с недефинирана експонента (11)

2.1. Апроксимиращ профил

Приближените решения използват апроксимиращ параболичен профил с недефинирана експонента [25-29]

$$T_a = T_s \left(1 - \frac{x}{\delta} \right)^n \quad (3)$$

Профилът (11) изпълнява граничните условия на Гудман (4a,b), а именно

$$T(0,t) = T_s \quad \text{или} \quad k \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=0} = q_0 \quad (4a,b)$$

$$T(\delta,t) = T_0 = 0 \quad \text{или} \quad k \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=\delta} = 0 \quad (4a,b)$$

2.2. Мащабиране на моделните уравнения

В случай на задача на Дирихле, използването на променливата $u = (T - T_0)/(T_s - T_0)$ или $u = T/T_s$ позволява да се получи безизмерната форма на апроксимиращия профил и граничните условия, а именно

$$u_a = (1 - x/\delta)^n, \quad u_a = T_a/T_s, \quad u_a(0,1) = 1, \\ u(\delta, t) = 0, \quad k \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{x=\delta} = 0 \quad (5)$$

В този случай безизмерната форма (само спрямо зависимата променлива) на моделното уравнение, използвайки $u = T/T_s$ е

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[a_0 (1 + \beta u) \frac{\partial u}{\partial x} \right] \quad (6)$$

Безизмерната форма (6) изисква линейната зависимост $k = k_0 [1 + \beta T]$ да бъде предварително мащабирана във вида

$$k = k_0 [1 + \beta (T/T_s)] = k_0 [1 + \beta u] \quad (7a,b)$$

2.3. Просто (еднократно) интегриране: HBIM (Simple integration: Heat-balance integral method, HBIM)

HBIM разглежда интегриране по дължина дифузионния слой $\delta(t)$

$$\frac{d}{dt} \int_0^\delta u dx = -a_0 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{x=0} - \beta \left(u \frac{\partial u}{\partial x} \right)_{x=0} \quad (8)$$

Обаче, ние можем да представим температурния градиент в (8) и (9a) като

$$a_0 (1 + \beta u) \frac{\partial u}{\partial x} \Rightarrow a_0 \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\beta}{2} \frac{\partial u^2}{\partial x} \right) \quad (9a)$$

След това, съотношението (8) може да се представи като (9b)

$$\frac{d}{dt} \int_0^\delta u dx = -a_0 \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\beta}{2} \frac{\partial u^2}{\partial x} \right)_{x=0} \quad (9b)$$

С използване на апроксимиращия профил (3), дясната страна на (9b) приема вида

$$-a_0 \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\beta}{2} \frac{\partial u^2}{\partial x} \right)_{x=0} = a_0 \left(\frac{n}{\delta} - \frac{\beta}{2} \frac{n(n-1)}{\delta^2} \right) \quad (9c)$$

Тази модификация, предложена тук, позволява да се решават нелинейни уравнения на топлинна дифузия. В примерите демонстрирани по-нататък е показано, че независимо от това вътрешно присъщия проблем с апроксимацията на градиента при $x = 0$ остава неразрешен.

3. ПРИМЕР 1: Зададена температура като гранично условие при $x = 0$

В тази част представяме приближени решения чрез HBIM и DIM, без предварителна обработка на линейната функционална зависимост (1c), за разлика от случая на зададен поток като гранично условие.

3.1. Решение с HBIM

Използването на апроксимиращия профил (5) води

$$\frac{d}{dt} \int_0^\delta \left(1 - \frac{x}{\delta} \right)^n dx = \frac{a_0}{\delta} n (1 + \beta) \quad (6a)$$

Резултатът, отчитайки началното условие $\delta(t=0) = 0$, е

$$\delta_{(HBIM)}^T = \sqrt{a_0 t} \sqrt{2n(n+1)} \sqrt{(1+\beta)} \quad (6b,c)$$

За $\beta = 0$ уравнение (6b) се редуцира до резултата от линейната задача

$\delta_{0(HBIM)}^T = \sqrt{a_0 t} \sqrt{2n(n+1)}$ [3,26]. Независимо от това, обаче, трябва да помним, че моделното уравнение (1b) с $\beta = 0$ е чисто параболично, докато за $\beta \neq 0$, даже и за много малки стойности на β , уравнение (1b) демонстрира поведение на дегенериращо уравнение поради

наличието на члена (произведението)
 $a_0 \beta T (\partial T / \partial x)$.

3.2. Решение с DIM

Използвайки, че $u(0, t) = u^{m+1}(0, t) = 1$,
 получаваме

$$\frac{1}{(n+1)(n+2)} \frac{d\delta^2}{dt} = a_0 \left(1 + \frac{\beta}{2}\right) \quad (7a,b)$$

Тогава, дълбочината на дифузионния слой е

$$\delta_{(DIM)}^T = \sqrt{a_0 t} \sqrt{(n+1)(n+2)} \sqrt{(1+\beta/2)} \quad (8)$$

За $\beta = 0$, уравнение (26) се редуцира до
 резултата на линейния задача

$\delta_{0(DIM)}^T = \sqrt{a_0 t} \sqrt{(n+1)(n+2)}$ [3,26], отчитайки
 коментарите относно този случай, направени
 в предишната точка.

3.3. Апроксимиращ профил и автомоделна променлива

Следователно, приближените решения
 могат да се представят във вида:

HBIM

$$u_{a(HBIM)} = \left(1 - \frac{x}{\delta}\right)^n = \left(1 - \frac{\eta}{F_{HBIM}^T(n, \beta)}\right)^n \quad (9a,b)$$

DIM

$$u_{a(DIM)} = \left(1 - \frac{x}{\delta}\right)^n = \left(1 - \frac{\eta}{F_{DIM}^T(n, \beta)}\right)^n \quad (9a,b)$$

където

$$F_{HBIM}^T(n, \beta) = \sqrt{2n(n+1)} \sqrt{(1+\beta)},$$

$$F_{DIM}^T(n, \beta) = \sqrt{(n+1)(n+2)} \sqrt{(1+\beta/2)} \quad (11a,b)$$

Параболичният профил директно
 дефинира автомоделната променлива
 $\eta = x / \sqrt{a_0 t}$. Числените коефициенти
 $F_{HBIM}^T(n, \beta)$ и $F_{DIM}^T(n, \beta)$ определят
 дълбочините на проникване, защото

за $\eta = F_{DIM}^T(n, \beta)$ получаваме $u_a = 0$, като
 пример.

В същото време, възможно е да се
 дефинират ефективна автомоделна променлива
 $\eta_{\beta(HBIM)} = x / \sqrt{a_0 t (1+\beta)}$, като пример. По този
 начин получаваме възможност числените
 коефициенти F_{HBIM}^T и F_{DIM}^T да са независими от
 β , и те стават еднакви с тези на линейната
 задача [26]. Независимо от това, обаче, с този
 подход ние губим физическата значимост на
 интегралното решение и това, че дълбочината
 на проникване зависи от β .

С цел да сравним интегралните и
 числените решения е по удобно да се представи
 профила чрез безизмерната променлива
 $X = x / \delta$ във вида $u_a = (1 - X)^n$. С тази
 независима променлива, решението се
 нормализира в квадрата $[1,1]$, защото $X \in [0,1]$
 и $u_a \in [0,1]$.

4.4. Оптимални експоненти на апроксимацията профил

При използване на моментния метод
 (the general moment method) [32,33] желаната
 точност се постига чрез увеличаване на броя на
 членовете в апроксимацията ред
 $u_a = \sum_{j=1}^N a_j (1 - x/\delta)^{n_j}$ (виж [25] (Глава 1.2) за
 детайли), т.е. чрез нарастване на броя на
 моментите включени в решението. Тъй като,
 както HBIM така и DIM, са ограничени до
 нулевия момент, тези методи използват само
 първият член на реда. Следователно, точността
 на апроксимацията зависи от стойността на
 експонентата n , защото коефициентът

$a_1 = u_s$ зависи от граничното условие при $x = 0$. Класическите експоненти [1, 26] са $n = 2$ и $n = 3$. Само, че когато експонентата n е предварително зададена, то грешката на апроксимация е предетерминирана. Сега ние фокусираме вниманието върху оптимизиране на експонентата n , с цел получаване на решения с минимална грешка на апроксимация, отчитайки че апроксимиращия профил е решение на интегралните съотношения, а не на моделното уравнение (1b).

4.4.1. Оценка на грешката и ограничения за експонентата n

Остатъчната функция $\varphi(u_a(x, t))$ се дефинира от условието приближеното решение да е решение на моделното уравнение (1b)

$$\varphi(u_a(x, t)) = \frac{\partial u_a}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(a_0 (1 + \beta u_a) \frac{\partial u_a}{\partial x} \right) \quad (12)$$

Ако u_a съвпада с точното решение, то тогава $\varphi(u_a(x, t)) = 0$, ако не, то трябва да се стреми към минимум, за дадена стойност на експонентата n (единственият параметър на профила, които не може да се определи чрез граничните условия). С профила $u_a = (1 - x/\delta)^n$ получаваме

$$\frac{\partial u_a}{\partial t} = \frac{nx}{\delta^2} \frac{d\delta}{dt} \left(1 - \frac{x}{\delta} \right)^{n-1} \quad (13a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(a_0 (1 + \beta u_a) \frac{\partial u_a}{\partial x} \right) &= \\ &= a_0 \left[\frac{n(n-1)}{\delta^2} \left(1 - \frac{x}{\delta} \right)^{n-2} + \beta \frac{n(2n-1)}{\delta^2} \left(1 - \frac{x}{\delta} \right)^{2n-2} \right] \end{aligned} \quad (13b)$$

За $x = 0$ остатъчната функция (14) намалява във времето (защото $\delta^2 \equiv t$), но ние трябва да я минимизираме по отношение на n

$$\varphi_T(0, t) = -\frac{a_0}{\delta^2} [n(n-1) + \beta n(2n-1)] \quad (14)$$

Следователно, търсейки положителни стойности на n , моделното уравнение се изпълнява при $n = (1 + \beta)/(1 + 2\beta)$, а от тук следва, че експонентата е по-малка от 1. Независимо от този резултат, необходимостта да се изпълняват условията на Гудман $u_a(\delta, t) = \partial u_a(\delta, t)/\partial x = 0$, води до

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow \delta} \varphi_T(\delta, t) &= \\ &= -\frac{n}{\delta^2} \left[(n-1) \lim_{x \rightarrow \delta} \left(1 - \frac{x}{\delta} \right)^{n-2} + \right. \\ &\quad \left. + \beta(2n-1) \lim_{x \rightarrow \delta} \left(1 - \frac{x}{\delta} \right)^{2n-2} \right] \end{aligned} \quad (15)$$

Следователно, трябва да е изпълняват едновременно две условия: $n-2 > 0 \Rightarrow n > 2$ и $2n-2 > 0 \Rightarrow n > 1$. Това води до общото условие $n > 2$.

4.4.2. Оптимални експоненти: Минимизация чрез критерия на Langford

Следователно, функцията $\varphi(u_a(x, t))$ трябва да достига минимум, когато $u_a \rightarrow u$, по цялата дължина на дифузионния слой δ , а именно $\int_0^\delta \varphi(u_a(x, t)) dx \rightarrow \min$. По-точно, ние

можем да изискваме $\int_0^\delta [\varphi(u_a(x, t))]^2 dx \rightarrow \min$,

което всъщност е критерият на Langford [34]

$$E_L(n, m, t) = \int_0^\delta \left[\frac{\partial u_a}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(a_0 u_a^m \frac{\partial u_a}{\partial x} \right) \right]^2 dx \rightarrow \min \quad (16)$$

С профила (5) и изразите (13a,b), след получаване на $\varphi_T^2(x,t)$, и последващо интегриране от 0 до δ , получаваме

$$E_{LT}(n, \beta, t) = \int_0^{\delta} \varphi_T^2(x, t) dx = \frac{1}{\delta^4} e_{LT}(n, \beta, \delta) \quad (17)$$

Следователно, като общ поглед, функцията $E_{LT}(n, m, t)$ намалява във времето със скорост пропорционална на $\delta^4 \equiv t^2$. При представянето на $E_{LT}(n, m, t)$ във формата (17), функцията $e_{LT}(n, \beta, \delta)$ не зависи от времето и трябва да бъде минимизирана по отношение на n , за

зададена стойност на β . При коректното определяне на минимума на $e_{LT}(n, \beta, \delta)$ се използва факта, че производението $\delta(d\delta/dt)$ не зависи от времето [25]. Процедурата на минимизация е подробно описана в [24,25] (Глава 1.1 и Глава 1.2) и за това тук големите изрази ще бъдат избегнати. Оптималните експоненти за решенията получени чрез HBIM и DIM, за различни стойности на β , са представени в Таблицы 1-4. Изходното ограничение при всички минимизации е $n > 2$.

Таблица 1. Оптимални експоненти на приближените профили: HBIM решения със зададена температура като гранично условие. Положителни стойности на β .

	$\beta = 0$	$\beta = 0.1$	$\beta = 0.2$	$\beta = 0.3$	$\beta = 0.4$	$\beta = 0.5$
n	2.2335	2.2605	2.2777	2.2839	2.2737	2.2253
$e_{MT(HBIM)}$	0.0169	0.0186	0.0213	0.0246	0.0283	0.0328

Table 2. Оптимални експоненти на приближените профили: HBIM решения със зададена температура като гранично условие. със зададена температура като гранично условие

	$\beta = 0.1$	$\beta = 0.2$	$\beta = 0.3$	$\beta = 0.4$	$\beta = 0.5$
n	2.2732	2.3244	2.3667	2.3933	2.3979
$e_{MT(HBIM)}$	0.0186	0.0213	0.0246	0.0283	0.0328

Таблица 3. Оптимални експоненти на приближените профили: DIM решения със зададена температура като гранично условие. Положителни стойности на β

	$\beta = 0$	$\beta = 0.1$	$\beta = 0.2$	$\beta = 0.3$	$\beta = 0.4$	$\beta = 0.5$
n	2.2187	2.1647	2.1136	2.0664	2.0236	1.985
$e_{MT(DIM)}$	0.0167	0.0198	0.0235	0.0276	0.0322	0.0369

Таблица 4. Оптимални експоненти на приближените профили: DIM решения със зададена температура като гранично условие. със зададена температура като гранично условие

	$\beta = 0.1$	$\beta = 0.2$	$\beta = 0.3$	$\beta = 0.4$	$\beta = 0.5$
n	2.1647	2.1136	2.0664	2.0236	1.985
$e_{MT(DIM)}$	2.2732	2.3244	2.3667	2.3933	2.3979

Таблица 5. Реални стойности на топлинния коефициент β за различни материали

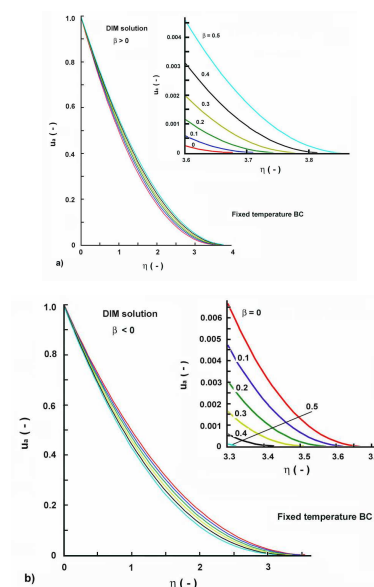
Material	β (1/K)	Ref
Iron	-0.00104	[35]
Cast Iron	-0.00105	[35]
Steel (0.83%C)	-0.00105	[35]
Steel (0.1%C, 5.15%Cr)	-0.00109	[35]
Wood (Larch)	0.012	[40]
Wood (Masson pine)	0.025	[40]
Wood (China fir)	0.007	[40]

Tin	-0.00057	[41]
Zinc	-0.00045	[41]
Indium	-0.00045	[41]
Aluminum	-0.00026	[41]

4.5. Сравнително представяне на интегралните решения с оптимални експоненти (*Benchmarking of the approximate solutions with optimal exponents*)

В тази точка са показани числени симулации на приближените интегрални решения и референтни числени решения с цел оценка на точността на апроксимация. В началото, симулациите са проведени със стойности на β , които са по-големи от тези съответстващи на реалните материали (виж Таблица 5). Това е направено специално, за да се демонстрират свойствата на приближените решения и получаване на графики с добре различаващи се криви. Освен това, диапазонът $[-0.5, 0.5]$ е използван за числени симулации от Succe and Hedge [5] и Mehta [15], така че този подход не е изключение при решения на приложни задачи.

Първо, с цел да демонстрираме ефекта на множителя β върху проникването на топлинната вълна в средата, приближените решения са представени на Фиг.1a,b. Като очакван резултат, за $\beta > 0$, повишената топлопроводност на материала се манифестира чрез нарастване на дълбочината на провикване δ (виж вложената фигура на Fig.1a). В обратния случай, за $\beta < 0$, дълбочината на проникване намалява с увеличаване на абсолютната стойност на β . Числените експерименти и свързаните с тях абсолютни грешки са показани на Фиг.2 и Фиг.3, съответно. Като обобщен резултат от тези



Фиг.1. Приблизени температурни профили за задача със зададена температура като гранично условие и решение чрез DIM: Вложени фигури : увеличени части на профилите в близост до фронта на слоя

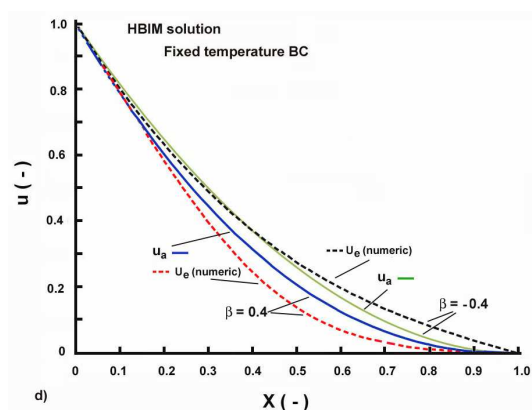
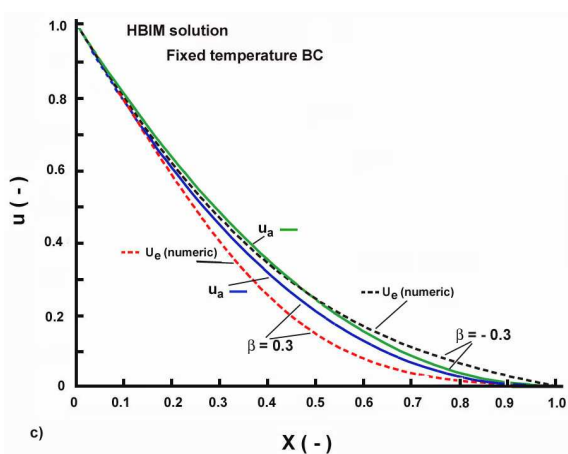
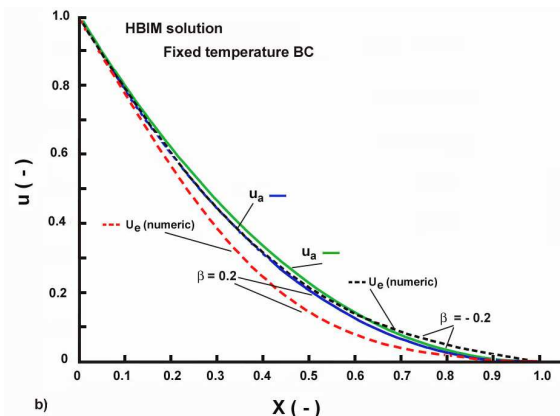
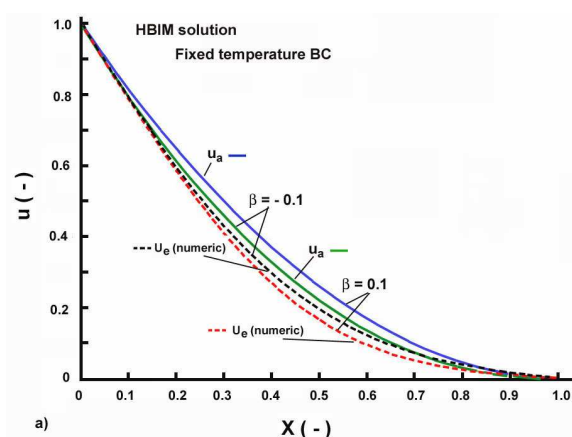
- a) Положителни стойности на β
- b) Отрицателни стойности на β

числени експерименти, може да се каже, че за $\beta < 0$, т.е. за повечето естествени материали, като чисти метали [35], точността на приближение на интегралните решения е по-добра от случаите за $\beta > 0$ (за сплави, композитни материали, дърво и т.н -виж Таблица 5).

В допълнение, също като очакван резултат, точността на DIM (виж Фиг. 4 и Фиг. 5) е по-добра от тази на решенията чрез HBIM (виж Фиг 3). Абсолютните грешки (виж Фиг. 6) и кривите на Фиг.3, (а също така и Фиг.4 и Фиг.5) потвърждават факта, че точността на приближените решения (както с HBIM така и с DIM) е по-голяма за $\beta < 0$. Границите на

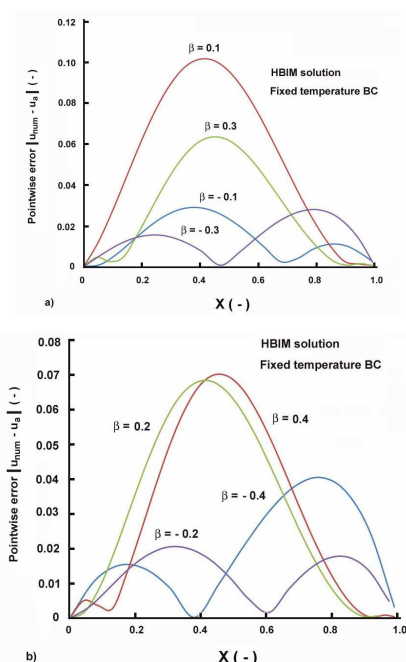
вариации на абсолютните грешки е типична за решения чрез интегрални методи [1], т.е. по-малка от 0.03. Преди всичко, нарастването на стойността на β води до повишени грешки на апроксимация. Важно е да се отбележи, че разделянето на β на положителни и отрицателни стойности е механистично. В обща форма, зависимостта за температурна зависимост на коефициента на топлинна дифузия може да са запише като $a = a_0(1 \pm \beta T)$. Положителният знак съответствува на нарастващ с температурата коефициент на топлинна дифузия, докато отрицателния знак съответствува на обратната тенденция.

Второ, числените експерименти с приближените решения, когато се използват реални стойности на β , както положителни така и отрицателни, проведени с данните представени в Таблица 1, и абсолютните грешки (виж Фиг.4) потвърждават вече изреченото мнение за качеството на приближените решения (виж Фиг. 3).

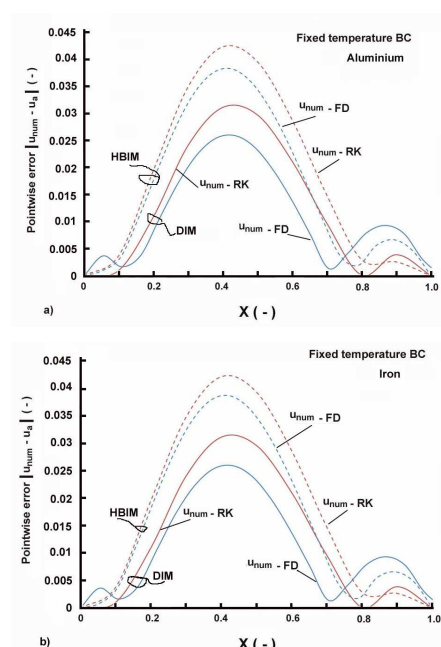


Фиг. 2. Температурни профили на приближени HBIM решения със зададена температура като гранично условие и референтни числени решения (крайни разлики)

- а) Случаи на $\beta = 0.1$ и $\beta = -0.1$; б) Случаи на $\beta = 0.2$ и $\beta = -0.2$; в) Случаи на $\beta = 0.3$ и $\beta = -0.3$; д) Случаи на $\beta = 0.4$ и $\beta = -0.4$.



Фиг. 3. Сравнение на приближените профили (HBIM решения) с референтни числени решения (крайни разлики) (виж също графините на фиг.2a,b,c,d): а) Случаи на $\beta = 0.1$, $\beta = -0.1$, $\beta = 0.3$ and $\beta = -0.3$
б) Случаи на $\beta = 0.2$, $\beta = -0.2$, $\beta = 0.4$ and $\beta = -0.4$



Фиг.4. Сравнение на приближените профили (DIM решения) за реални материали с референтни числени решения ((крайни разлики и Runge-kutta-4th order) (виж кривите на Фиг.7) .

- а) Случай на алуминий с $\beta < 0$
б) Случай на дърво с $\beta > 0$

5. ПРИМЕР 2: Зададен поток като гранично условие при $x = 0$

Тази част на настоящата глава представя три различни стратегии за развитие на интегралните решения, когато граничното условие е дефинирано като

$$-k(T) \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=0} = q_0 \quad (18)$$

- Директно използване на HBIM и DIM
- Смяна на променливите
- Предварително премащабиране на функционалната зависимост на коефициента на топлопроводност от температурата.

5.1. Директно прилагане на HBIM и DIM

Разглеждаме случай, когато адитивната функция (1с) $k = k_0 (1 + \beta T)$ не е мащабирана (is not scaled) във вида $k = k_0 (1 + \beta T/T_{ref})$. В този случай, прилагайки граничното условие получаваме, че

$$\begin{aligned} - \left[k_0 (1 + \beta T) \frac{\partial T}{\partial x} \right]_{x=0} &= q_0 \text{ или} \\ -k_0 \left[\frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\beta}{2} \frac{\partial T^2}{\partial x} \right]_{x=0} &= q_0 \end{aligned} \quad (19a,b)$$

5.1.1. Решение с HBIM

Прилагайки HBIM и апроксимация профил (5), получаваме

$$\frac{d}{dt} \int_0^\delta T_s \left(1 - \frac{x}{\delta} \right)^n dx = -a_0 \left[(1 + \beta T) \frac{\partial T}{\partial x} \right]_{x=0} \quad (20)$$

От (19b) и (13b) получаваме, че $-\left[(1 + \beta T) \frac{\partial T}{\partial x} \right]_{x=0} = q_0/k_0$ и следователно, дясната страна на (20) може да бъде заместена с $a_0 q_0/k_0$. Тази операция води до следния резултат

$$\frac{1}{n+1} \frac{d}{dt} (T_s \delta)^{n+1} = a_0 \frac{q_0}{k_0} \quad (21a,b)$$

В израза (21a) ние отчитаме, че повърхностната температура $T_s(t)$ зависи от времето.

Интегрирането на (21b), с начално условие $(T_s \delta)_{t=0} = 0$ води до следната зависимост

$$T_s = (a_0 t) \frac{q_0}{k_0} \frac{1}{\delta} (n+1) \quad (22a,b)$$

Сега, следващата задача е да се определи $\delta(t)$. Граничното условие (19a,b) представено чрез апроксимация профил (виж формата на уравнение 19b) е

$$T_s + \beta T_s^2 = \frac{q_0}{k_0} \frac{\delta}{n} \quad (23a,b)$$

Замествайки T_s от (22b) в (23b) получаваме

$$\delta^3 - \delta(a_0 t) n(n+1) - \beta \frac{q_0}{k_0} (a_0 t)^2 n(n+1)^2 = 0 \quad (24)$$

За $\beta = 0$, резултатът от уравнение (24) се редуцира до $\delta_{0(NBIM)}^q = \delta_0 = \sqrt{(a_0 t) n(n+1)}$, което е решението на линейната задача чрез NBIM [3,26]. Уравнение (24) позволява да се получи приближено решение относно δ (виж **Допълнение В на Глава 1.3**), а именно

$$\delta(t) \approx (a_0 t)^{\frac{2}{3}} \left[n^{\frac{1}{3}} (n+1)^{\frac{2}{3}} \right] \left(\frac{\beta q_0}{4 k_0} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (25)$$

С резултата (25) повърхностната температура T_s (22b) може да се представи приближено като

$$T_s \approx (a_0 t)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{q_0}{k_0} \right)^{\frac{2}{3}} \left(\frac{n+1}{n} \right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{4}{\beta} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (26)$$

5.1.2. Решение чрез DIM

С основното интегрално съотношение на DIM получаваме и апроксимация профил представен чрез (3) получаваме от (27) следното уравнение

$$\frac{1}{(n+1)(n+2)} \frac{d}{dt} (T_s \delta^2) = a_0 \left(T_s + \frac{\beta}{2} T_s^2 \right) \quad (27)$$

Граничното условие (виж 23b) ни дава зависимостта $T_s + \beta T_s^2 = \frac{q_0}{k_0} \frac{\delta}{n}$ и следователно, диференциалното уравнение относно произведението $T_s \delta^2$ е

$$\frac{d}{dt} (T_s \delta^2) = a_0 \frac{q_0}{k_0} (n+1)(n+2) \frac{\delta}{n} - a_0 \frac{\beta}{2} T_s^2 \quad (28)$$

В термини на T_s , граничното условие (23b) е квадратно уравнение с положителен корен

$$T_s = \frac{1}{2\beta} \left(\sqrt{1 + 4\beta \frac{q_0}{k_0} \frac{\delta}{n}} - 1 \right) \quad (29a,b)$$

След това, (28) може да се трансформира в уравнение относно една зависима променлива δ използвайки (29a,b). **Очевидно е, че е трудно да се намери директно явен израз за $\delta(t)$. В този момент ние спираме развитието на решението чрез DIM и ще коментираме някои основни проблеми свързани с директно прилагане на техники на интегриране към задачата на Нюман.**

5.1.3. NBIM или DIM, когато е зададен поток като гранично условие?

С резултатите (28) и (29) ние можем да формулираме следния въпрос:

Необходимо ли е да се използва метода с двойно интегриране за задача, когато потока е дефиниран на границата и коефициента на топлинна дифузия е представен чрез зависимостта (1c) (Is it reasonable to apply the double integration approach to the case when the flux is defined at

the boundary and the thermal diffusivity is in the form (1c) ?

Отговорът може да бъде намерен в причините да се използва DIM [2]. Всъщност, двойното интегриране е предложено в [2] за решение на хидродинамични задачи разглеждащи скоростния профил в граничен слой, където скоростта на твърдата граница $x=0$ е дефинирана (where the velocity at the rigid wall ($x=0$) is defined [36]). Тази ситуация съответствува на задачата със зададена температура като гранично условие. Тъй като простото интегриране (т.е. HBIM) изисква градиента $\partial T/\partial x$ да бъде дефиниран за $x=0$, чрез апроксимиращия профил, то тогава двойното интегриране отстранява недостатъка на HBIM и прави дясната страна на интегралното съотношение независеща от апроксимиращия профил.

Следователно, когато потокът е дефиниран на границата, прилагането на DIM изисква дефиниране на повърхностната температура T_s в дясната страна на интегралното съотношение. Това може да бъде направено посредством граничното условие, но в този случай T_s зависи от избора на апроксимиращия профил (виж 23a,b). В резултат на това, ние получаваме нов проблем за разрешаване, а именно определяне на повърхностната температура от силно нелинейна зависимост и е ясно, че няма реална полза от използването на DIM, ако се прилага директно към задачата, където коефициента на топлинна дифузия е представен чрез (1c) (there are no benefits when DIM is **applied directly** to solve the problem with a thermal diffusivity expressed as the additive function 1c). За разлика

от този случай, използването на простия подход (т.е. HBIM), позволява потокът директно да бъде инкорпориран в дясната страна на интегралното съотношение.

В контекста на горните коментарии, естествено възниква следния въпрос:

Дали адитивната функция (1c) е подходящата форма за корелация на експерименталните данни, когато нелинейният коефициент на топлинна дифузия трябва да се инкорпорира в енергийното (дифузионно) уравнение (1b)? (Does the additive function (1c) is the suitable form to correlate experimental data when the nonlinear thermal diffusivity should be incorporated in the energy equation (1b)?). **Отговорът е отрицателен.** Обяснение на този отговор и възможните стратегии за разрешаване на възникващите проблеми са развити в следващите точки.

5.2. Решения чрез смяна на променливата

Нека дефинираме променливата $U = 1 + \beta T$. Тогава с $\partial U/\partial t = \beta(\partial T/\partial t)$ и $\partial U/\partial x = \beta(\partial T/\partial x)$ ние можем да трансформираме моделното уравнение и граничното условие в една нова форма

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(a_0 U \frac{\partial U}{\partial x} \right) \quad (30)$$

$$-\left[U \frac{1}{\beta} \frac{\partial U}{\partial x} \right]_{x=0} = \frac{q_0}{k_0} \quad (31)$$

Новото уравнение (30) е дегенериращо дифузионно уравнение [2,37,38,39] с решение развиващо се с рязък фронт. В специалния случай, когато коефициента на дифузия е нелинеен, но се представя чрез степенна зависимост $a = a_0 U^m$ (за $m=1$), задачата може

да се реши чрез HBIM и DIM (виж [25] (Глава 1.2) и цитираните там източници).

Ако приложим трансформацията $U = 1 + \beta T$ към апроксимиращия профил (3), т.е. $\bar{U}_a = 1 + \beta T_a = 1 + \beta T_s (1 - x/\delta(n))^n$ получаваме

$$\partial \bar{U}_a(\delta_U)/\partial x = \beta \partial T_a(\delta)/\partial x = 0 \quad (32a)$$

и

$$\bar{U}_a(0, t) = \bar{U}_s = 1 + \beta T_a(0, t) = 1 + \beta T_s \quad (32b)$$

Само че, в този случай $\bar{U}_a(\delta) = 1$ и следователно граничните условия на Гудман не се изпълняват.

Тогава, ние можем да реконструираме апроксимиращия профил като

$$U_a = (1 + \beta T_s) \left(1 - \frac{x}{\delta_U}\right)^p = U_s \left(1 - \frac{x}{\delta_U}\right)^p \quad (33)$$

Сега, за $x = 0$, $U_a(0, t) = U_s = 1 + \beta T_s$. Следователно, трансформацията използвана, за да се получи уравнение (30) е в сила. Освен това, граничните условия на Гудман напълно се изпълняват от U_a , а именно:

$$\partial U_a(\delta_U)/\partial x = U_a(\delta_U) = 0 \text{ и } U_a(\delta_U) = 0$$

Граничното условие (31) дефинира U_s като

$$U_s = \left(\beta \frac{q_0}{k_0} \frac{\delta_U}{p}\right)^{\frac{1}{2}} = Q_0^{\frac{1}{2}} \beta^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\delta_U}{p}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad Q_0 = (q_0/k_0)^{\frac{1}{2}} \quad (34a, b, c)$$

Това условие изисква $U_s = 1 + \beta T_s > 0$, което означава, че необходимото условие при този подход е $\beta > 0$ в (34b).

Уравнение (30) може да се пре-мощабира (rescaled) в термини на променливата

$$S = U/(Q_0)^{1/2} \text{ като}$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(A_s S \frac{\partial S}{\partial x} \right), \quad A_s = a_0 \beta^{1/2} \quad (35a, b)$$

По-нататък, с $S_a = U_a/(Q_0)^{1/2}$ апроксимиращия профил се представя в проста форма като:

$$S_a = \left(\beta \frac{\delta_U}{p} \right)^{\frac{1}{2}} \left(1 - \frac{x}{\delta_U} \right)^p \quad (36)$$

Прилагайки HBIM към (35a), с профила (36), получаваме

$$\delta_{U(HBIM)}^q = (A_s t)^{\frac{2}{3}} p^{\frac{1}{3}} (p+1)^{\frac{2}{3}} = (a_0 t)^{\frac{2}{3}} (\beta)^{\frac{1}{3}} F_{p(HBIM)} \quad (37a, b)$$

$$F_{p(HBIM)} = p^{\frac{1}{3}} (p+1)^{\frac{2}{3}} \quad (37c)$$

Уравнение (37a) е специален случай на решението чрез HBIM на (35a) [25] (Глава 1.2):

$$\delta_{HBIM(power-law)} = (A_s t)^{\frac{m+1}{m+2}} p^{\frac{1}{m+2}} (p+1)^{\frac{m+1}{m+2}} \quad (37d)$$

за $m = 1$

Оптималната експонента в този случай е $p_{opt(HBIM)}^q \approx 0.799$. Нека помним, че в този случай $p_{opt(HBIM)}^q < 1$, както е показано в [25] (Глава 1.2).

По-нататък, решението чрез DIM на (35a) с профила (36), получено в [25], е

$$\delta_{U(DIM)}^q = (a_0 t)^{\frac{2}{3}} (\beta)^{\frac{1}{3}} F_{p(DIM)} \quad (38a, b)$$

$$F_{p(DIM)} = \left[p(p+1)(p+2) \left(\frac{3}{10} \right) \right]^{\frac{2}{3}} \quad (38c)$$

Уравнение (38a) е специален случай на решение чрез DIM на (35a) [25], а именно

$$\delta_{DIM(power-law)}^q = (A_s t)^{\frac{m+1}{m+2}} \left[p^m (p+1)(p+2) \left(\frac{m+2}{(m+1)(2m+3)} \right) \right]^{\frac{m+1}{m+2}} \quad (39)$$

за $m = 1$

Оптималната експонента в този случай е $p_{opt(HBIM)}^q \approx 0.870$ [25] (Глава 1.2).

Сега, в термини на U_a , получаваме

$$U_a = (\beta Q_0)^{\frac{1}{2}} S_a = (\beta Q_0)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\delta_U}{p} \right)^{\frac{1}{2}} \left(1 - \frac{x}{\delta_U} \right)^p,$$

$$U_s = (\beta Q_0)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\delta_U}{p} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (40a,b)$$

Обратната трансформация $T = (U - 1)/\beta$ води

$$T_a = \frac{U_a - 1}{\beta} =$$

$$= \frac{1}{\beta} \left[(\beta Q_0)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\delta_U}{p} \right)^{\frac{1}{2}} \left(1 - \frac{x}{\delta_U} \right)^p - 1 \right] \quad (41)$$

От (40b), използвайки обратната трансформация (или от (60) за $x = 0$) получаваме повърхностната температура

$$T_s = \frac{1}{\beta} \left[(\beta Q_0)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\delta_U}{p} \right)^{\frac{1}{2}} - 1 \right] \quad (42a)$$

Уравнение (42a) може да се представи в една физически адекватна форма, а именно

$$T_s = T_{ref} + \left(\frac{Q_0}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\delta_U}{p} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (42b)$$

Отчитайки вида на изразите за δ_U (у-ние 37b и у-ние. 38b) ние имаме възможност да получим от израза (42b) един мащабиращ израз по отношение на температурната разлика (*the excess surface temperature*) $T - T_{ref}$, по-точно

$$T_s - T_{ref} = A_{qp} \beta^{-\frac{1}{6}} (a_0 t)^{\frac{1}{3}}, \quad A_{qp} = Q_0^{\frac{2}{3}} (F_p/p)^{\frac{1}{2}} \quad (42c,d)$$

Резултатът (42c) е физически адекватен и лесно може да се види, че β оказва влияние на наклона на кривите $T_s - T_{ref} = f(t)$. Коефициентът $\sqrt{F_p}$ не зависи от β , но зависи от използваната техника на интегриране (NBIM или DIM). В допълнение, с увеличаване на β ,

нагряваното тяло провежда топлината от повърхността към обема на тялото по-бързо, в сравнение със среда с по-малки β , защото T_s е обратно пропорционална на $\beta^{1/6}$. Като следствие, среда с ниско β ще бъде по-„гореща“ на повърхността в сравнение с среда с висока стойност на β , когато еднакви топлинни потоци се прилагат на границата $x = 0$. Този ефект е илюстриран чрез числените експерименти в точка 5.5.

5.3. Решение чрез предварително премащабиране на зависимостта на коефициента на топлопроводност

5.3.1. Предварително премащабиране на зависимостта на коефициента на топлопроводност и смяна на променливите

Основната нелинейност на разглеждания модел е в резултат на адитивната формулировка на температурния ефект върху коефициента на топлопроводност

$$k = k_0 + \gamma T \Rightarrow k_0 (1 + \varepsilon T), \quad \varepsilon = \gamma/k_0 \quad (43a)$$

$$a = a_0 + \frac{\gamma}{\rho C_p} T \Rightarrow a_0 (1 + \beta T),$$

$$\beta = \varepsilon = \frac{\gamma}{a_0 \rho C_p} = \frac{\gamma}{k_0} \quad (43b)$$

Размерността на γ е $[Wm^{-1}K^{-2}]$, а β е с размерност $[K^{-1}]$. Зависимостта (43a) е най-често срещаната корелация на експериментални данни, като γ е наклонът (положителен или отрицателен) [5,32,40]). Тъй като, стойността на k_0 съответствува на дадена референтна температура T_{ref} , координатната рамка $k - T$ може да бъде транслирана (*can be shifted*) така

, че нейното начало да бъде в точката k_0 (its origin will be at the point k_0). Това лесно може да стане чрез проста трансляционна трансформация

$$k_{shift} = (k - k_0) = \gamma(T - T_{ref}) \text{ или}$$

$$\alpha = (a - a_0) = a_0 \beta (T - T_{ref}) \quad \alpha = a - a_0 \quad (44a,b)$$

Зависимостта (44) е същата като (43), защото трансформацията запазва наклона $\gamma = k_0 \beta$. В (44b) α е *транслиран коефициент на топлинна дифузия* (shifted thermal diffusivity).

5.3.2. Смяна на променливите

С новата променлива $\theta = (T - T_{ref})$ (the excess temperature), зависимостта (63b) може да се представи като $\alpha(\theta) = a_0 \beta \theta$, което е специален случай на степенна зависимост $\alpha(\theta) = a_0 \beta \theta^m$ за $m = 1$. Важно е да се отбележи, че трансформацията на зависимостта $a(T)$ (или $k(T)$) не зависи от извода на основния модел (is independent of the derivation of the basic model) представен чрез уравнения (1a,b). Единственият ефект на тази трансформация е, че енергийното уравнение *си сменя температурната скала* (the energy equation shifts in the temperature scale), т.е. имаме $\theta = T - T_{ref}$, което е *свръх температура* (excess temperature). С новата променлива θ , уравнението за топлопроводност (1b) се представя във вида

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[a_0 \beta \theta \frac{\partial \theta}{\partial x} \right] \quad (45a,b)$$

При формата на уравнение (45b) няма загуба на общност, защото референтната температура T_{ref} е константа, а тя може да бъде равна и на началната температура на средата

T_0 . Важно е да се отбележи, че няма смяна на мащаба за дължина. Моделът (45) е дегенериращо дифузионно уравнение [25,36-39], като по-горе полученото уравнение (30), защото коефициента на дифузия става нула за $\theta = 0$. Решението се разпространява с крайна скорост и добре дефиниран рязък фронт, разделящ смутената и несмутените части на средата, за разлика от формата (15), която е чисто параболично уравнение. В същност, моделът (45) е уравнението на Бусинеск [25,37,39].

5.3.3. Решения

Интегралните решения на (45) получени в [25] (Глава 1.2) и интегралните съотношения на HBIM и DIM, за $m = 1$, са

HBIM

$$\frac{d}{dt} \int_0^\delta \theta(x,t) dx = -a_0 \beta \theta \frac{\partial \theta(0,t)}{\partial x} \quad (46)$$

RIM

$$\frac{d}{dt} \int_0^\delta x \theta(x,t) dx = \frac{a_0 \beta}{2} [\theta(0,t)]^2 \quad (47a)$$

Или с DIM

$$\int_0^\delta \left(\int_x^\delta \frac{\partial \theta}{\partial t} dx \right) dx = \frac{a_0 \beta}{2} [\theta(0,t)]^2 \quad (47b)$$

С транслираната координатна рамка

$[k_{shift} = (k - k_0), \theta]$ граничното условие е

$$\begin{aligned} -k_{shift} \left[(T - T_{ref}) \frac{\partial (T - T_{ref})}{\partial x} \right] &= q_0 \Rightarrow \\ \Rightarrow - \left[\beta \theta \frac{\partial \theta}{\partial x} \right]_{x=0} &= \frac{q_0}{k_0} \end{aligned} \quad (48)$$

Апроксимиращият профил, който изпълнява граничните условия на дифузионния слой може да представи като $\theta_a = \theta_s (1 - x/\delta_s)^5$. Тогава повърхностната температура

$\theta_s = \theta(0, t)$ може да се дефинира посредством (48) като

$$\theta_s = \left(\frac{1}{\beta} \frac{q_0}{k_0} \frac{\delta}{s} \right)^{1/2} \quad (49)$$

Като следствие, ние получаваме (34) което е очакван резултат, защото променливата $U = 1 + \beta T$ с $\beta = -1/T_{ref}$ (виж уравнение (42a) и свързаните коментари) може да се представи като:

$$U = 1 - T/T_{ref} = -(T - T_{ref})/T_{ref} = \beta(T - T_{ref}).$$

Следователно, решението в термини на U е, в същност, решение в термини на *мащабираната върх температура* (in term of the scaled excess temperature) $\beta\theta$ (виж 44b), независимо, че стартовите точки за двете решения са различни. В допълнение, уравнение (30) не се променя, ако променливата е $U - \beta T$, което много лесно се проверява.

По-нататък, с променливата $\Theta_a = \theta_a / \sqrt{(q_0/k_0)/\beta}$ (аналогична на променливата S_a) ние можем да представим апроксимация профил във вида

$$\Theta_a = \left(\frac{\delta}{s} \right)^{\frac{1}{2}} \left(1 - \frac{x}{\delta_s} \right)^s, \quad \Theta_s = \left(\frac{\delta}{s} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (50, b)$$

Тогава, от (48) и (50b) интегралното решението чрез на DIM, получено в [25] (Глава 1.2), е

$$\delta_{s(DIM)}^q = (a_0 t)^{\frac{2}{3}} \beta^{\frac{1}{3}} \left[s(s+1)(s+2) \right]^{\frac{2}{3}} \left(\frac{3}{10} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (51)$$

Следователно, *класическият закон* $\delta(t) \equiv \sqrt{t}$ се губи в резултат на *нелинейността на границата* $x = 0$. Решението (51) потвърждава резултатите (25) и (38b), а точно че фронтът се движи със скорост

пропорционална на $t^{2/3}$. Още повече, лесно може да се провери, че решението чрез НВИМ за дълбочината на проникване е във формата представена от (25), защото транслираният коефициент на топлинна дифузия (shifted thermal diffusivity) е $\alpha(\theta) = a_0 \beta \theta$. За транслирания модел (shifted model) (45b), решенията чрез НВИМ и DIM имат оптимални експоненти $n_{opt(НВИМ)}^q \approx 0.799$ и

$$n_{opt(DIM)}^q \approx 0.870 [25].$$

В този момент, получавайки идентични решения с променливите U и θ , естествено възниква следния въпрос:

Кой от подходите е физически коректен? Да се използва U или θ ?

Физически коректния отговор е: решението чрез променливата U , защото в този случай коефициентът на топлинна дифузия в трансформираното уравнение остава равна на a_0 . Транслираният коефициент на топлинна дифузия няма физически смисъл и този подход е само удобна математическа техника за решение. Освен това, лесно може да се провери, че ако в уравнение (45b) коефициентът β не е „инкорпориран“ в „транслирания коефициент на топлинна дифузия“ $\alpha(\theta) = a_0 \beta \theta$, то тогава имаме, $\alpha(\theta) = a_0 U$, защото съвсем просто се вижда, че $U = \beta \theta$.

Следователно, за да обобщим резултатите, след смяната на променливите ние получаваме дегенериращо дифузионно уравнение със степенна зависимост на коефициента от температурата. Неговите интегрални решения са известни и лесно сравними с известни точни числени или приближени решения публикувани в литературата. Тогава, посредством обратна смяна на променливите, лесно могат да се получат приближени решения, които са адекватни с линейна зависимост на дифузионния коефициент. Независимо от това, обаче, ние трябва да помним, че с *реверсираните приближени решения* (the reversed approximate solutions) минимизацията на остатъчната функция, конструирана посредством оригиналното уравнение (1b), *дефинират нови оптимални експоненти*. Този

проблем е дискутиран и разрешен в следващата точка.

5.4. Експонентите на апроксимирания профил

В този момент на анализа, изглежда, че ние разрешихме проблема с оптималните експоненти, по отношение на интегралните решения на трансформираното уравнение (30) с променливата U . Но това не е точна стойност и за това е необходима допълнителна оптимизационна процедура. Причината за това е фактът, че получения профил посредством δ_U изразен чрез (37) и (38) беше оптимизиран за да се изпълнява уравнение (30) (да се минимизира остатъчната функция).

С позната конструкция на функциите $F_{p(NBIM)}$ и $F_{p(DIM)}$, дефинирани от (37с) и (38с), а защо така и с помощта на уравнение (42а) задачата е : *минимизиране на функцията на средноквадратичната грешка*

$$\int_0^{\delta} \left[\varphi_q(T_a(x,t)) \right]^2 dx . \text{ Процедурата е обяснена}$$

[25] (Глава1.2), но съдържа големи изрази, които тук не са представени. Независимо от това, ние можем да определим ограниченията за експонентата p за $x=0$, с процедура подобна на тази използвана в **Пример 1**.

С координата на Zener [25,42] $\xi = x/\delta$, $0 < \xi < 1$, нормализирания апроксимиращ профил $\phi_a = T_a/\beta^{1/2} = (\delta/p)^{1/2} (1-x/\delta_U)^p$ може да се представи като $\phi_a = \delta_U^{1/2} Y(\xi, t)$, където $Y(\xi, t) = (1/p)^{1/2} (1-\xi)^n$. От дифузионното уравнение (1b) ние можем да дефинираме

функцията на остатъчната грешка $\Phi_q(\xi, t)$ в пространство ξ , а именно

$$\Phi_q(\xi, t) = \left[\frac{1}{2} \delta_U^{1/2} \frac{d\delta_U}{dt} Y - \delta_U^{1/2} \frac{d\delta_U}{dt} \xi \frac{\partial Y}{\partial \xi} \right] \frac{1}{\delta_U} - a_0 \frac{1}{\delta_U} \frac{\partial^2 Y}{\partial \xi^2} - a_0 \beta \left[\frac{1}{\delta_U} Y^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{\partial Y}{\partial \xi} \right)^2 \right] \quad (52)$$

От изискването $\Phi_q(0, t) \geq 0$ следва, че

$$p \leq \frac{1+\beta}{1+2\beta} = \frac{1}{1+\varepsilon}, \quad \varepsilon = \frac{\beta}{1+\beta} \quad (53a,b,c)$$

Границите за p са $\lim_{\beta \rightarrow 0} p = (1+\beta)/(1+2\beta) = 1$,

а за големи β : $\lim_{\beta \rightarrow \infty} p = (1+\beta)/(1+2\beta) \approx 1/2$.

За $\beta = 0.5$, като пример, получаваме $p \leq 0.75$, докато за $\beta = 0.1$ ограничението е $p \leq 0.911$.

Функцията на средно квадратичната

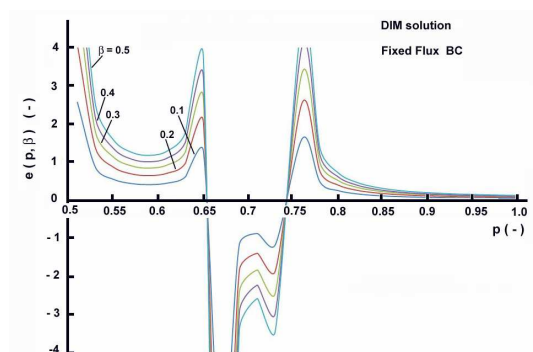
грешка $E_{Mq} = \int_0^1 \left[\Phi_q(\xi, t) \right]^2 d\xi$ може да се

представи (чрез DIM решение) като отношение $E_{Mq(DIM)} = e_{Lq}(p, \beta) / \delta_U^4$.

Рационалната функция $e_{Lq}(p, \beta)$ не зависи от времето и трябва да бъде минимизирана по отношение на p , за дадени стойности на β .

Знаменателят на $e_{Lq}(p, \beta)$ дефинира множество вертикални асимптоти в горния квадрант и една наклонена асимптота за $p < 0$.

Поведението на $e_{Lq}(p, \beta)$ за различни стойности на β , използвани в тази работа, е показано на Фиг.5.



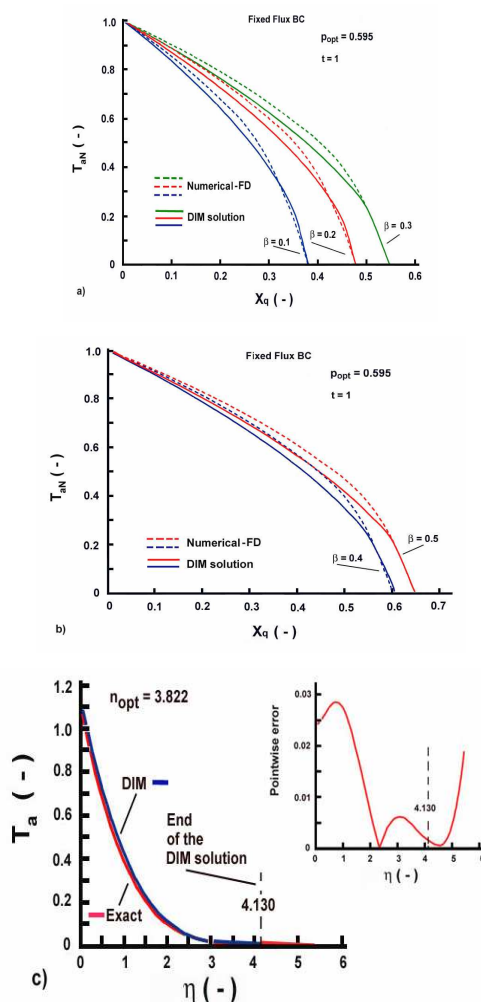
Фиг.5. Поведение на независещия от времето компонент на функцията средноквадратичната грешка $e(p, \beta)$, която трябва да се минимизира по отношение на p . DIM решения и зададен поток като гранично условие за различни стойности на $\beta > 0$.

Ние имаме две добре дефинирани зони с положителни стойности на p , $0.5 < p < 0.65$ и $p > 0.75$. Двете ограничения наложени на експонентите за $0.1 \leq \beta \leq 0.5$ чрез условията (53b) се изпълняват само в границите $0.5 < p < 0.65$. Независимо от това, трудно е да види ясен минимум $e_{Lq}(p, \beta)$, когато $0.5 < p < 0.65$. Чрез промяна на p (*solvitur ambulando approach*) в тази зона и оценявайки стойностите на $e_{Lq}(p, \beta)$ ние можем да определим оптималната експонента p_{opt} . Този подход води до една средна стойност $p_{opt} \approx 0.595$ за всички решения, независимо от стойността на β . Допълнителни числени експерименти с експонента $p = 0.870$, определена чрез трансформираното уравнение (30) и $p_{opt} \approx 0.595$ са представени в следващата точка.

5.5. Сравнение с числени решения

Приемайки средната стойност на оптималната експонента $p_{opt} \approx 0.595$ за всички решения, независимо от β , ние получаваме

задоволителни резултати от приближените решения (виж Фиг.6a,b),



Фиг. 6. Зададен поток като гранично условие. Нормализирани температурни профили

$$T_{aN} = T_s / \left[(Q_0 / \beta)^{1/2} (\delta_U / p) \right]$$

за DIM решения и числени решения (крайни разлики) за $t = 1$ и оптимална експонента $p_{opt} = 0.595$.

a) Случаи за $\beta = 0.1$, $\beta = 0.2$ и $\beta = 0.3$

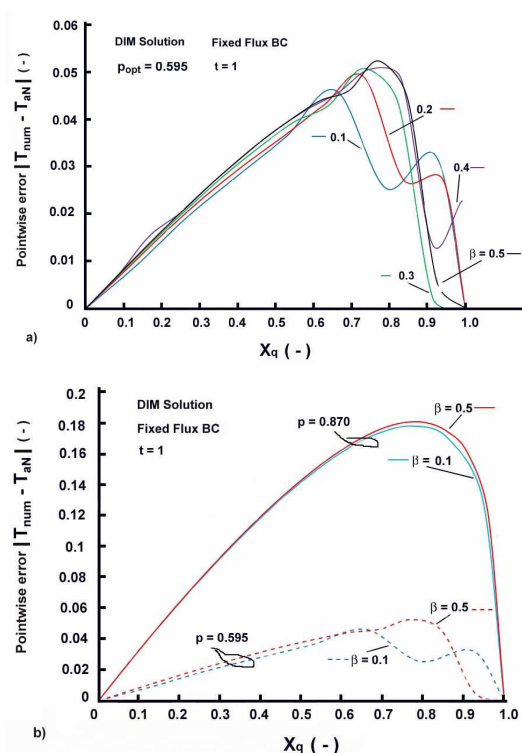
b) Случаи за $\beta = 0.4$ и $\beta = 0.5$

Случай за $\beta = 0$. Comparison of the exact and DIM solutions. Inset: pointwise error. The DIM solutions ends at 4.13η .

защото всички абсолютни грешки (виж Фиг.7a) са по-малки от 0.05 (в екстремните части на тези криви, т.е. в близост до фронта $x \rightarrow \delta$,

или за $X_q = x/\delta \rightarrow 1$), когато се сравняват с числените решения.

За разлика от този случай (с $p_{opt} \approx 0.595$), при използване на $p = 0.870$, грешките могат да достигнат неприемливи стойности (чак до 0.18) (виж Фиг.7b). Специалният случай за $\beta = 0$ е показан на Фиг.6с (виж коментарите в следващата точка).

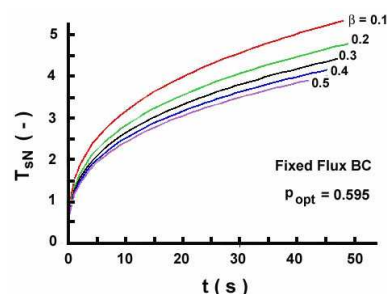


Фиг.7. Зададен поток като гранично условие. Абсолютни грешки на апроксимации. Сравнение на нормализираните приближени профили (DIM решения T_{an} с числени решения T_{num} (крайни разлики) за $t = 1$

а) Случаи за $\beta > 0$ и $p_{opt} = 0.595$. б) Случаи за $\beta > 0$ и две експоненти на профила $p_{opt} = 0.595$ и $p = 0.870$

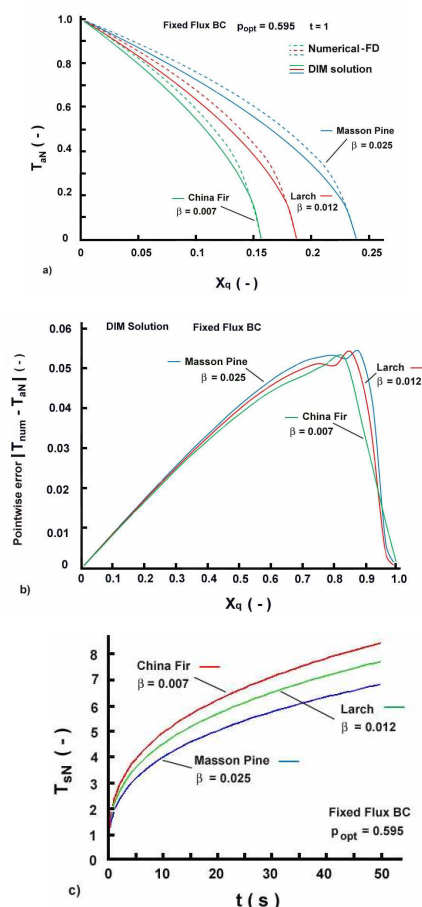
Графичното представяне на резултатите на Фиг.6а,б ясно показва как коефициентът β влияе върху решенията и определя дълбочините на проникване. По-точно, с нарастване на

стойността на β ($\beta > 0$), дълбочината на проникване нараства, т.е. имаме по-лесно разпространение на топлинната вълна в средата, поради повишен коефициент на топлинна дифузия, и обратно. Като директно следствие на ефекта на β върху повишаването на температурата, с помощта на уравнение (45), лесно може да се демонстрира временната еволюция на нормализираната повърхностна температура T_s (виж Фиг. 8).



Фиг.8 Зададен поток като гранично условие. Еволюция във времето на нормализираната повърхностна температура $(T - T_{ref})/A_{qp} = \beta^{-\frac{1}{6}} t^{\frac{2}{3}}$ (виж уравнение 61). $p_{opt} = 0.595$

Като последна точка от този сравнителен анализ, приближените решения бяха проверени с реални стойности на $\beta > 0$, за три различни дървени материали (виж Таблица 5). Профилите на Фиг.9а демонстрират адекватно поведение, когато се използват решения чрез DIM. Абсолютните грешки (Фиг.9б) потвърждават поведението на интегралните решения за големи стойности на β (т.е. за $-0.5 \leq \beta \leq 0.5$) с грешки по-малки от 0.006 (в екстремалната зона в близост до фронта δ), които са вътрешно присъщи за този тип решения. Нарастването на повърхностната температура за три типа дървен материал е показана на Фиг.9с.



Фиг.9 Зададен поток като гранично условие. Решения с реални данни отнасящи се за дърво с $\beta > 0$ (виж Таблица 5).

- (DIM) и референтни числени решения (крайни разлики) за дървени образци
- Абсолютни грешки между DIM и числени решения (крайни разлики).

Еволюция във времето на нормализираната повърхностна температура $(T - T_{ref})/A_{qp} = \beta \frac{1}{6} t^{\frac{2}{3}}$ за образци от дърво (виж уравнение 42 $p_{opt} = 0.595$)

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Goodman T.R., Application of Integral Methods to Transient Nonlinear Heat Transfer. In: *Advances in Heat Transfer*, T. F. Irvine and J. P. Hartnett, eds., 1(1964), pp. 51–122 Academic Press, San Diego, CA
- [2] Volkov, V.N., Li-Orlov, V.K., A Refinement of the Integral Method in Solving the Heat Conduction Equation, *Heat Transfer Sov Res* 2 (1970), pp. 41–47
- [3] Myers, J.G., Optimizing the exponent in the heat balance and refined integral methods, *Int Comm Heat Mass Transfer*, 36 (2009), pp.143–147
- [4] Cobble, M.H., Non-linear heat transfer if solids in orthogonal coordinate systems, *Int. J. Non-linear Mech.*, 2 (1967), pp. 417–4126.
- [5] Sucec, J., Hedge, S., Transient conduction in slab with temperature dependent thermal conductivity, *Transaction of ASME*, 100 (1978), pp. 172–174.
- [6] Lin, S.H., Transient heat conduction with temperature-dependent thermal conductivity by the orthogonal collocation method, *Lett. Heat Mass Transfer*, 5 (1978), pp.29–39.
- [7] Noda, N., Thermal stresses in materials with temperature dependent properties, IN: G.A.Schneider, G.,Petzow (Eds.), *Thermal shock and thermal fatigue behaviour of advanced ceramics*, 15–26, (1993), Kluwer Academics Publ.
- [8] Khaleghi, H., Gandji, D.D., Sadighi, A., Application of variational iteration and homotopy-perturbation methods to nonlinear heat transfer equations with variable coefficients, *Numer. Heat Transfer A*, 52 (2007), pp. 25–42.
- [9] Liu, W., Li, L., Yue, J., Liu, H., Yang, L., A kind of analytical model of arc welding temperature distribution under varying material properties, *Int. J. Adv.Manuf. Technol.*, 2015, DOI: 10.1007/s00170-015-7260-6
- [10] Aziz, A., Benzie, J.Y., Application of perturbation techniques for heat-transfer problems with variable thermal properties, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 19 (1976), pp.271–2716.
- [11] Aziz A., Perturbation solution for convective fin with internal heat generation and temperature dependent thermal conductivity, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1977;20 (1977),pp. 1253–1255.
- [12] Krajewski, B., On a direct variational method for nonlinear heat transfer, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 18 (1975), pp. 495–502.
- [13] Aziz, A., Bouaziz, M.N., A least square method for a longitudinal fin with temperature dependent internal heat generation and thermal conductivity, *Energy Convers Manage.*, 52 (2011), pp.2876–2882.
- [14] Alhama, F., Zueco, J., Application of a lumped model to solids with linearly temperature-dependent thermal conductivity, *Appl. Math. Modell*, 31(2007), pp. 302–310.
- [15] Mehta, R.C., On the solution of transient conduction with temperature-dependent thermal conductivity, *J. Heat Transfer*, 99 (1979), pp.137–139.
- [16] Das, R., Mishra, S.C., Uppaluri, R., Retrieval of thermal properties in a transient conduction-radiation problem with variable thermal conductivity, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 52(2009), pp.2749–2758.
- [17] Parveen, N., Alim, M.A., MHD free convection flow with temperature dependent thermal conductivity in presence of heat

- absorption along a vertical wavy surface, *Procedia Engineering*, 56 (2013), pp.68 – 75 .
- [18] Tomatis, D., Heat Conduction in nuclear fuel by the Kirchhoff transformation. *Ann Nucl Energy*, 57(2013), pp.100-105
- [19] Chang, K.C., Payne, U.J., Analytical and numerical approaches for heat conduction in composite materials, *Math. Comp. Modelling*, 14(1990), pp. 899-904.
- [20] Chang, K.C. , Payne, U..J., Analytical solution for heat conduction in a two-material-layer slab with linearly temperature dependent conductivity, *J. Heat Transfer*, 113(1991), pp. 237-239.
- [21] Pipes,L.P., *Applied mathematics for engineers and scientists*, 2nd ed., p.18., McGraw-Hill (1958).
- [22] Khan, Z.H., Gul, R., Khan, W.A. Effect of variable thermal conductivity on heat transfer from a hollow sphere with heat generation using homotopy perturbation method. In Proc. ASME Summer Heat Transfer Conf, 2008, August 1-14, 2008, Article HT2008-56448, Jacksonville, Florida, USA. (2008)
- [23] Yen, Y.C. Approximate solutions of heat conduction in snow with linear variation of thermal conductivity, *Cold Regions Sci. Technol.* 17 (1989),pp. 21-32.
- [24] Hristov, J., An approximate analytical (integral-balance) solution to a nonlinear heat diffusion equation, *Thermal Science*, 19(2015), pp. 723-733;
- [25] Hristov, J. Integral solutions to transient nonlinear heat (mass) diffusion with a power-law diffusivity: a semi-infinite medium with fixed boundary conditions, *Heat Mass Transfer*, 52 (2016), pp.635-655.
- [26] Hristov, J., The heat-balance integral method by a parabolic profile with unspecified exponent: Analysis and Benchmark Exercises, *Thermal Science*, 13 (2009), pp. 27-48
- [27] Mitchell, S, L., Myers, T. G., Application of standard and refined heat balance integral methods to one-dimensional Stefan problems, *SIAM Review*, 52 (2010) , pp. 57–86
- [28] Sadoun, N., Si-Ahmed, E.K., Colinet,P. , On the refined integral method for the one-phase Stefan problem with time-dependent boundary conditions, *Appl Math Model*, 30 (2006), pp. 531–544
- [29] Mitchell, S, L., Myers, T. G. , A heat balance integral method for one-dimensional finite ablation, *AIAA J. Thermophys*, 22 (2008), pp. 508–514
- [30] Hristov, J. Approximate solutions to time-fractional models by integral balance approach, In: Fractional Dynamics, C. Cattani, H.M. Srivastava, Xia-Jun Yang, (eds), De Gruyter Open, 2015,pp.78-109.
- [31] Hristov, J. Double Integral-Balance Method to the Fractional Subdiffusion Equation: Approximate solutions, optimization problems to be resolved and numerical simulations, *J. Vibration and Control*, (2016) in press ; DOI: 10.1177/1077546315622773
- [32] Ames, W.F., *Nonlinear partial differential equation in engineering*, Academic Press N.Y. (1965)
- [33] Prasad, S.N., Salomon, J.B., A new method for analytical solution of a degenerate diffusion equation, *Adv. Water Research*, 28 (2005), pp.1091-1101
- [34] Langford, D., The heat balance integral method. *Int J Heat Mass Transfer*, 16 (1973), pp. 2424-2428
- [35] Shelton, S.M., Thermal conductivity of some iron and steel over the temperature 100 to 500 °C, *Bureau of Standards Journal of Research*, vol 12. (1934).
- [36] Pohlhausen, K., Zur näherungsweise Integration der Differentialgleichungen der laminaren Grenzschicht, *J.Appl Math Mech ZAMM* 1 (1921), pp. 252–290.
- [37] Lacey, A.A., Ockendon, J.R., Tayler, A.B., Waiting-time solutions of a nonlinear diffusion equation, *SIAM J Appl Math*, 42 (1982),pp. 1252-1264
- [38] Hill, J.M., Similarity solutions for nonlinear diffusion- a new integration procedure. *J. Eng, Math*, 23 (1989),pp. 141-155
- [39] Smyth, N.F., Hill, J.M., High-Order Nonlinear Diffusion, *IMA J Appl Math*, 40 (1988), pp. 73-86.
- [40] Y, Z.T., Xu, X., Fan, L.W., Hu, Y.C., Cen, K.F., Experimental measurements of thermal conductivity of wood species in China: Effects of density, temperature and moisture content. *Forest Prod. J*,61(2011),pp.130–135.
- [41] Aksöz, S., Öztürk, E., Marasli, N., The measurement of thermal conductivity variation with temperature for solid materials, *Elsevier Measurement*, 46 : (2012),pp. 161-170
- [42] Zener, C., Theory of growth of spherical precipitates from solid solutions. *J Appl Phys*, 20 (1949), pp.950-953

ГЛАВА 1.4

НЕСТАЦИОНАРНА ТОПЛОПРОВОДНОСТ С КОЕФИЦИЕНТ НА ТОПЛИННА* ДИФУЗИЯ С ПОТЕНЦИАЛНО-СТЕПЕННА ЗАВИСИМОСТ ОТ ТЕМПЕРАТУРАТА:

Кратко представяне на решение чрез
интегрален метод

Получено е приближено аналитично решение (closed-form approximate solution) на нестационарна нелинейна топлопроводност с линейна потенциално-степенна зависимост между коефициента на топлопроводност и температурата $k = k_0(1 \pm \beta T^m)$ чрез използване на метода на интегралния баланс. Решения на задача на Дирихле са получени с класическия метод на интегралния топлинен баланс (Heat-balance Integral method, HBIM) и метода с двойно интегриране (Double-integration method DIM). Тази глава допълва резултатите получени в Глава 1.3

1. ВЪВЕДЕНИЕ

Тази глава може да се разглежда като кратко продължение на решенията получени в [1] (Глава 1.3). Тя разглежда нестационарна топлопроводност в полубезкрайна среда със зависещ от температурата коефициент на топлинна дифузия и моделирана чрез уравненията

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (1)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(a(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (2)$$

$$a = a_0 (1 + \beta T^m), \quad m > 0 \quad (3)$$

Зависимостта (3) е от *линейно потенциално-степен тип*, за $m \neq 1$. Тя свързана

преди всичко с температурната зависимост на коефициента на топлопроводност $k = k_0(1 + \beta T^m)$, при основно допускане, че произведението ρC_p не зависи от температурата [2,3,4,5].

Проблемите свързани с линейната версия на зависимостта (3) бяха решени и дискутирани в [1] (Глава 1.3), и поради това, ние ще преминем директно към проблема, който трябва да решим.

Използването на интегралния метод за решаване на нелинейни дифузионни уравнения чрез неговата проста форма (HBIM) [6] и метода на двойно интегриране (DIM) [7], са приложими към уравнение (2), когато функцията $a(T)$ е представена чрез степенна зависимост $a = a_0 T^m$ без предварителна линеаризация на моделното уравнение. Още повече, резултатите от [1] (Глава 1.3), с функцията (3) за $m=1$ демонстрират как тази стратегия за решение може да се приложи и в случая на адитивна функция моделираща зависимостта $a(T)$.

Интегралният метод използва принципа, че дифузанта (топлина или маса) прониква в средата с крайна скорост и на крайна дълбочина δ . Следователно, граничните условия, далеч от границата $x=0$, дефинирани като (4)

$$T(\infty) = 0 \quad \text{и} \quad \frac{\partial T}{\partial x}(\infty) = 0 \quad (4)$$

могат да бъдат заменени с две нови (5a,b)

$$T(\delta) = 0 \quad \text{и} \quad \frac{\partial T}{\partial x}(\delta) = 0 \quad (5a,b)$$

* Публикувано като: Antoine Fabre, Jordan Hristov, Rachid Bennacer, Transient heat conduction in materials with linear power-law temperature-dependent thermal conductivity, *Fluid Dynamics & Materials Processing*, Vol.12, No.1, pp.69-85, 2016; DOI: [10.3970/fdmp.2016.012.069](https://doi.org/10.3970/fdmp.2016.012.069)

Условията (5a,b) дефинират рязък фронт на движение $\delta(t)$ на границата между смутената и несмутената части на средата, когато дадено гранично условие се приложи на границата $x = 0$. Позицията на $\delta(t)$ е неизвестна и трябва да бъде определена в процеса на решението.

С цел да опростим развитието на решението, въвеждаме безизмерната променлива $u = T/T_s$, което позволява моделното уравнение да се представи в безизмерна форма само по отношение на зависимата променлива $u(x, t)$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial x} \left[a_0 (1 + \beta u^m) \frac{\partial u}{\partial x} \right] \quad (6)$$

$$a(T) = a_0 \left[1 + \beta (T/T_s)^m \right] = a_0 (1 + \beta u^m) \quad (7a,b)$$

където T_s е температурата при $x = 0$, а коефициента β може да бъде както положителен, така и отрицателен. В този случай, съответните гранични условия са

$$u(0,1) = 1, u(\delta, t) = 0 \text{ и } k \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{x=\delta} = 0 \quad (8a,b,c)$$

2. МЕТОД ЗА РЕШАВАНЕ НА ПРОБЛЕМА

2.1. Подход с НВІМ

Ако приложим класическия НВІМ към уравнение (7) получаваме

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^\delta u dx = -a_0 \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\beta}{m+1} \frac{\partial u^{m+1}}{\partial x} \right)_{x=0} \quad (9)$$

Уравнение (10) е основното интегрално съотношение на НВІМ по отношение на разглежданото приближено решение. Наистина, ако трансформацията в дясната страна на (6) не се прилага, то ние не можем да получим същия

резултат, както в случая на $a = a_0$, която не зависи от температурата. Следователно, чрез трансформацията се създава възможност да получим решение на нелинейната задача чрез използване на интегралния метод.

2.2. Подход с DIM (RIM)

Използвайки техниката на DIM (RIM)

получаваме

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^\delta x u dx = -a_0 \left(u + \frac{\beta}{m+1} u^{m+1} \right) \quad (11)$$

Уравнение (11) е основното интегрално съотношение на DIM отнасящо се за нелинейната задача разглеждана тук.

2.3. Апроксимиращ профил

Приближените решения използват апроксимиращ параболичен профил с недефинирана експонента [6,7,11, 12,13,14,15]

$$T_a = T_s \left(1 - \frac{x}{\delta} \right)^n \quad (12)$$

Профилът (12) изпълнява граничните условия на Гудман (5a, b) [16], а именно

$$T(0, t) = T_s \text{ или } k \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=0} = q_0 \quad (13a,b)$$

$$T(\delta, t) = T_0 = 0 \text{ или } k \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=\delta} = 0 \quad (14a, b)$$

3. РЕШЕНИЕ

3.1. Задача на Дирихле

За задачата на Дирихле, използвайки безизмерната променлива $u = (T - T_0)/(T_s - T_0)$

или $u = T/T_s$ получаваме безизмерна форма на апроксимация профил

$$u_a = (1 - x/\delta)^n, \quad u_a = T_a/T_s \quad (15)$$

Профилът (16) изпълнява граничните условия (8) и тези при $x = 0$, именно

$$u_a(0,1) = 1, \quad u(\delta, t) = 0, \quad k \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{x=\delta} = 0 \quad (16)$$

В този случай моделните уравнения са (6) и (7b)

3.1.1. Решение с HBIM

Прилагането на интегралното съотношение (9) на HBIM, с използване на безизмерния профил $u_a = (1 - x/\delta)^n$, води до

$$\frac{\partial \delta^2}{\partial t} = a_0 n(n+1)(1+\beta) \quad (17a)$$

$$\delta_{HBIM} = \sqrt{a_0 t \sqrt{2n(n+1)(1+\beta)}} \quad (17b)$$

Ако коефициентът на топлинна дифузия не зависи от температурата (т.е. $\beta = 0$), тогава резултатът (17b) се редуцира до решението на Myers [17], а именно $\delta_{HBIM(\beta=0)} = \sqrt{a_0 t \sqrt{2n(n+1)}}$.

Важно е да се отбележи, че нелинейността представено чрез експонентата m изчезва и следователно решението чрез HBIM не може да се прилага за случая на $m \neq 1$. В допълнение, обикновено имаме $|\beta| < 1$ и тогава от (17b), следва че $\delta_{HBIM} > \delta_{HBIM(\beta=0)}$ за $\beta > 0$. В обратния случай за $\beta < 0$ се наблюдава ретардацията на фронта.

3.1.2. Решение с DIM

Прилагането на съотношението на DIM (11) води до

$$\frac{\partial \delta^2}{\partial t} \frac{1}{(n+1)(n+2)} = a_0 \left(1 + \frac{\beta}{m+1} \right) \quad (18)$$

$$\delta_{DIM} = \sqrt{a_0 t \sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{m+1}} (m+1+\beta)}$$

За $\beta = 0$ получаваме линейния случай и резултатът е този получен в [14], а именно. $\delta_{DIM(\beta=0)} = \sqrt{a_0 t \sqrt{(n+1)(n+2)}}$. За $m > 0$ и $\beta > 0$ е ясно, че it is obvious that $\delta_{DIM\beta=0} < \delta_{DIM}$, което е свързано с факта, че ако стойността на m или коефициента β нараства, в резултат дълбочината на проникване също нараства, поради по-големият коефициент на топлинна дифузия.

3.2. Приблизени решения

Следователно приближените решения са HBIM

$$u_{a(HBIM)} = \left(1 - \frac{x}{\sqrt{a_0 t \sqrt{2n(n+1)(1+\beta)}}} \right)^n \quad (19)$$

DIM

$$u_{a(DIM)} = \left(1 - \frac{x}{\sqrt{a_0 t \sqrt{(n+1)(n+2)(1+\frac{\beta}{m+1})}}} \right)^n \quad (20)$$

4. ОПТИМИЗИРАНЕ НА ПРИБЛИЖЕНИТЕ РЕШЕНИЯ

В основната постановка на метода на моментите [18,19] необходимата точност се постига чрез повишаване на броя на членовете в

реда $u_a = \sum_{j=1}^N a_j (1-x/\delta)^{n_j}$ (виж лит. 19 за допълнителни коментари), т.е. чрез нарастване на броя на моментите включени в решението. Тъй като НВМ и DIM са методи използващи нулевия и първия момент, съответно, ние се ограничаваме само с първия член на реда. В този случай точността зависи от стойността на експонентата n защото коефициентът $a_1 = u_s$ зависи от граничното условие за $x=0$. Класическият метод на Гудман [11,16] използва $n=2$ или $n=3$, но в този случай грешката от апроксимация е предетерминирана.

4.1. Определяне на n чрез приравняване на дълбочините на проникване на НВМ и DIM

Тъй като дълбочината на проникване е физически дефинирана величина, то следва, че тя трябва да бъде една и съща, независимо от използвания метод на интегриране. От тази гледна точка и използвайки получените резултати имаме $\delta_{НВМ} = \delta_{DIM}$, а по-точно

$$\sqrt{2(n+1)n(1+\beta)} = \sqrt{(n+1)(n+2)(1+\frac{\beta}{m+1})} \quad (21)$$

Решението на (24) по отношение на n е

$$n_{m,\beta} = \frac{2(m+1+\beta)}{m+1+\beta+2m\beta} \quad (22a)$$

Ако $m \gg |\beta|$, тогава можем да опростим (25a) и резултатът е

$$n_{m,\beta} = 2 \frac{1+\frac{\beta}{m+1}}{1+2m\frac{\beta}{m+1}} \Rightarrow n_{m,\beta} \approx 2 \quad (22b)$$

За $\beta=0$ получаваме експонентата на Гудман $n_{\beta=0}=2$ и това е граничната стойност, когато $m \gg |\beta|$. Следователно, нарастването на нелинейността чрез експонентата m трябва да влияе по-силно на стойностите на $n_{m,\beta}$, защото на практика $m \gg |\beta|$ и стойностите на реалните коефициенти β са от порядъка на 10^{-4} [9,10], (виж повече детайли в [1] (Глава 1.3)).

4.2. Глобална оптимизация за определяне на n

4.2.1. Грешка при апроксимация и ограничение за експонентата n

Сега ние се фокусираме върху оптимизацията на експонентата n чрез минимизиране на функцията на средноквадратичната грешка, защото приближено решение трябва да изпълнява условията на оригиналното дифузионно уравнение, а не само на интегралните съотношения (10) и (12).

Функцията на остатъчната грешка $\varphi(u_a(x,t))$ може да се дефинира от изискването приближеният профил да е решение на моделното уравнение (6)

$$\varphi(u_a(x,t)) = \frac{\partial u_a}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(a_0 (1+\beta u_a^m) \frac{\partial u_a}{\partial x} \right) \quad (23a)$$

Ако u_a съвпада с точното решение, то тогава $\varphi(u_a(x,t))=0$. Ако това е невъзможно, следва, че тази функция трябва да достига определен минимум за дадена стойност на експонентата.

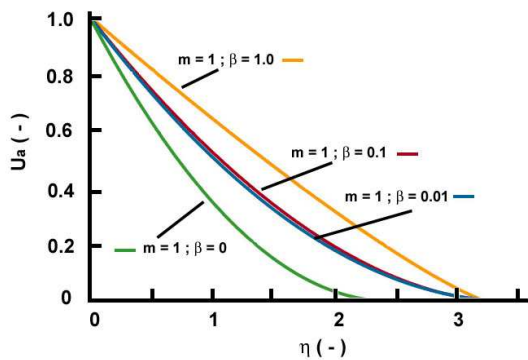
С профил $u_a = (1 - x/\delta)^n$, за условията на границата $x = 0$, получаваме

$$\varphi(0, t) = -\frac{n(n-1) + \beta n(n(m+1)+1)}{\delta^2} \quad (23b)$$

Търсейки положителни стойности на n , получаваме, че

$$n = \frac{\beta+1}{1+\beta(m+1)} \quad (24)$$

Следователно, понеже n трябва да е положителна, то от тук следва, че уравнението на топлопроводност се изпълнява за $n = (\beta+1)/[1+\beta(m+1)]$.



Фиг.1: Безразмерни температурни профили с експоненти получени чрез приравняване на дълбочините на проникване определени с решенията на НВІМ и DIM за задачата със зададена температура като гранично условие от $m=1$. $\eta = x/\sqrt{a_0 t}$ е променливата на Болцман е.

В същото време е необходимо да се провери как се изпълняват граничните условия на Гудман за $x = \delta$, където $n > n_{\min} = (\beta+1)/[1+\beta(m+1)]$. Следователно, оценката за n чрез приравняване на дълбочините на проникване получени с

решенията на НВІМ и DIM (виж 22a, b), е адекватна, защото сравнявайки (24) и (22a) получаваме

$$\frac{2(m+1+\beta)}{m+1+\beta+2m\beta} > (\beta+1)/[1+\beta(m+1)] \quad (24b)$$

за $m \gg |\beta|$

Освен това, за $x \rightarrow \delta$ получаваме:

$$\begin{aligned} \varphi(\delta, t) &= \frac{n(n-1)}{\delta^2} \lim_{x \rightarrow \delta} (1 - x/\delta)^{n-2} + \\ &+ \frac{\beta n(n(m+1)-1)}{\delta^2} \lim_{x \rightarrow \delta} (1 - x/\delta)^{n(m+1)-2} = 0 \end{aligned} \quad (25)$$

Следователно, дифузионно уравнение се изпълнява за $x = \delta$ при $n > 2/(m+1)$. Това ограничение се изпълнява даже и за $m=0$, където ограничението е $n > 2$, т.е. това е основното условие за решенията чрез НВІМ [1,11,13,14].

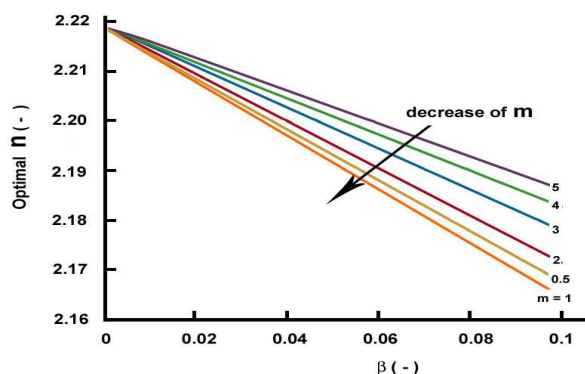
4.2.2. Оптимални експоненти

Прилагайки критерият на Langford [20] целта е минимизация на функцията на средноквадратичната грешка $E_L(n, \beta, m, t)$ по дължината на дифузионния слой δ

$$E_L(n, \beta, m, t) = \int_0^\delta \left[\frac{\partial u_a}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(a_0 (1 + \beta u_a^m) \frac{\partial u_a}{\partial x} \right) \right]^2 dx \quad (26)$$

Процедурата вече беше описана в предходните глави и тук изразите не са представени. Резултатите от числени експерименти демонстриращи влиянието на параметъра $m \neq 1$ върху оптималните експоненти са показани на Фиг.2.

Глава 1.4 Нестационарна топлопроводност с коефициент на дифузия с потенциално-степенна зависимост



Фиг 2: Влияние на параметъра $m \neq 1$ върху оптималната експоната на профила (DIM решение)

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Fabre A., Hristov J. (2016): On the integral-balance approach to the transient heat conduction with linearly temperature-dependent thermal diffusivity, *Heat Mass Transfer*, 53 (2017), pp. 1777-2014 .
- [2] Cobble M.H., Non-linear heat transfer if solids in orthogonal coordinate systems, *Int. J. Non-linear Mech.* 2 (1967), pp.417-4126.
- [3] Sucec J., Hedge S., Transient conduction in slab with temperature dependent thermal conductivity, *Transaction of ASME*, 100(1978), pp. 172-174.
- [4] Lin S.H., Transient heat conduction with temperature-dependent thermal conductivity by the orthogonal collocation method, *Lett. Heat Mass Transfer*, 5(1978), pp. 29-39.
- [5] Noda N. Thermal stresses in materials with temperature dependent properties, In: Schneider G.A., Petzow G. (Ed.), *Thermal shock and thermal fatigue behaviour of advanced ceramics*, 1993, Kluwer Academics Publ. (1993), pp. 15-26.
- [6] Hristov J. An approximate analytical (integral-balance) solution to a nonlinear heat diffusion equation, *Thermal Science*, 19 (2015), pp.723-733.
- [7] Hristov J. Integral solutions to transient nonlinear heat (mass) diffusion with a power-law diffusivity: a semi-infinite medium with fixed boundary conditions, *Heat Mass Transfer*, 52, (2016), pp.635-655.
- [8] Alhama F., Zueco J. ,Application of a lumped model to solids with linearly temperature-dependent thermal conductivity, *Appl. Math. Modell.*, 31 (2007), pp. 302–310.
- [9] Shelton S.M., Thermal conductivity of some iron and steel over the temperature 100 to 500 °C, *Bureau of Standards Journal of Research*, vol 12, (1934) .
- [10] Y Z.T., Xu X., Fan L.W., Hu Y.C., Cen K.F. Experimental measurements of thermal conductivity of wood species in China: Effects of density, temperature and moisture content. *Forest Prod. J.* , 61 (2011) , pp. 130–135.
- [11] Hristov J., The heat-balance integral method by a parabolic profile with unspecified exponent: Analysis and Benchmark Exercises, *Thermal Science*, 13 (2009), pp.27-48.
- [12] Hristov J., Double Integral-Balance Method to the Fractional Subdiffusion Equation: Approximate solutions, optimization problems to be resolved and numerical simulations, *J. Vibration and Control*; in press. (2015): DOI: 10.1177/1077546315622773
- [13] Mitchell S.L., Myers T.G. , A heat balance integral method for one-dimensional finite ablation, *AIAA J. Thermophys.*, vol. 22 (2008), pp.508–514.
- [14] Mitchell S. L.; Myers T. G., Application of standard and refined heat balance integral methods to one-dimensional Stefan problems, *SIAM Review*, 52 (2010), pp. 57–86.
- [15] Sadoun N., Si-Ahmed E.K., Colinet P., On the refined integral method for the one-phase Stefan problem with time-dependent boundary conditions, *Appl Math Model.* , 30 (2006) ,pp. 531–544.
- [16] Goodman T.R. , Application of Integral Methods to Transient Nonlinear Heat Transfer. In: *Advances in Heat Transfer*, T. F. Irvine and J. P. Hartnett, eds., vol. pp.51–122, Academic Press, San Diego, CA (1964)
- [17] Myers T.G., Optimizing the exponent in the heat balance and refined integral methods. *Int Comm Heat Mass Transfer*, 36 (2009), pp.143-147.
- [18] Ames W.F., *Nonlinear partial differential equation in engineering*. Academic Press N.Y. (1965).
- [19] Prasad S.N.; Salomon J.B., A new method for analytical solution of a degenerate diffusion equation. *Adv. Water Research*, 28 (2005), pp. 1091-1101.
- [20] Langford D., The heat balance integral method, *Int J Heat Mass Transfer*, 16 (1973), pp.2424-2428

ГЛАВА 1.5

ИНТЕГРАЛНО РЕШЕНИЕ НА НЕСТАЦИОНАРНА ДИФУЗИЯ* ЧРЕЗ ДРОБНИ ПРОИЗВОДНИ И ИНТЕГРАЛИ ОТ ПОРЯДЪК 1/2

Тази глава представя един нов подход при използване на метода на интегралния баланс за приближени решения на дифузионни уравнения с постоянни гранични условия и дробни производни (и интеграли) на Riemann-Liouville от порядък $1/2$. Дробните производни (и интеграли) заместват повърхностния градиент, който в класическия метод на Гудман (HBIM) и в метода с двойно интегриране (DIM) трябва да се изрази чрез апроксимиращия профил. Използването на дробни производни от порядък $1/2$ намалява грешката от апроксимация до нива по-ниски от тези демонстрирани от класическите решения получени чрез HBIM и DIM. Методът е демонстриран чрез решения на задачите на Дирихле и Нюман.

1. ВЪВЕДЕНИЕ

Интегралният метод [1] за приближено решение на параболични модели използва принципа на крайна дълбочина на проникване на дифузанта, което е физически мотивиран подход следващ от решението на по-пълното хиперболично уравнение, като по този начин се дефинира рязък фронт на движение на решението. Решенията с използване на интегралния метод за чисто аналитични [2, 3] и практически ориентирани моделни изследвания [4-9]. Простотата на метода е все още атрактивна

за изследвания [10-12] и в тази посока са развити няколко негови модификации [13-15].

В основата на интегралния метод е изборът на апроксимиращ профил [16], който трябва да изпълнява граничните условия в двата края на дифузионния (топлинен) слой. Всъщност, този подход е метод на нулевия момент, който трансформира основното дифузионно уравнение в обикновено диференциално уравнение по отношение на фронта на решението. Най-разпространеният подход е с използване на апроксимиращи профили под формата на полиноми от степен 2 или 3 [2, 17,18], така както те са предложени в класическата работа на Гудман [1]. По-гъвкаво приложение на интегралния метод може да направи с използване на параболичен профил с недефинирана експонента [10,11,16,19]. Основният принцип и проблемите възникващи при прилагане на интегралния метод са формулирани по-долу.

Нестационарната дифузия (на топлина или маса), в хомогенна среда с постоянен транспортен коефициент (коефициента на дифузия) a , се моделира чрез параболично уравнение, което в безразмерна форма само по отношение на температурата (концентрацията) е

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = a \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2}, \quad \theta(x, t) = 0 \quad \text{за } t < 0 \quad (1)$$

Най-простото приложение на интегралния метод е познато като метод на интегралния топлинен баланс (*heat-balance integral method*, HBIM) [1,20]. При използване на HBIM, интегрирането на уравнение (1) по отношение на пространствената координата, в

* Публикувано като: Hristov J., An Alternative Integral-Balance Solution to Transient Diffusion of Heat (Mass) by time-Fractional Semiderivatives and Semiintegrals: Fixed boundary conditions, *Thermal Science*, 20 (2016),6, pp. 2149-2160; DOI:10.2298/TSCI150917010H

границите на дифузионния слой с дълбочина δ , води до следното интегрално съотношение

$$\frac{d}{dt} \int_0^{\delta} \theta(x,t) dx = -a \frac{\partial \theta}{\partial x}(0,t) \quad (2a,b)$$

В случай на полубезкрайна среда, стойността на $\theta(x,t)$ на голямо разстояние от границата $x=0$ се приема $\theta(\infty,t)=0$. Въвеждането на рязък фронт на решението заменя това гранично условие с две нови, а именно

$$\theta(\delta)=0 \text{ и } \frac{\partial \theta}{\partial x}(\delta)=0 \quad (3a,b)$$

Заместването на θ с апроксимиращ профил θ_a позволява, чрез интегриране в (2b), да се получи обикновено диференциално уравнение относно $\delta(t)$. Основен проблем, по-точно недостатък, на HBIM е апроксимацията на градиента в дясната страна на (4), защото той трябва да се изрази чрез апроксимация профил. Една стъпка напред, избягваща този проблем, е използване на двойно интегриране (Refined Integral Method, **RIM** или Double-Integration Method, **DIM**) [11,21,22] когато се разглежда задачата на Дирихле, като основен пример.

Настоящата глава (и поддържащата я публикация) представя една нова техника при използване на интегралния метод, позволяваща да се подобри резултата от интегрирането. Новият момент разглежда повърхностния поток (т.е. градиента при $x=0$) да бъде представен чрез израз включващ съответното гранично условие и дробни по време производни и интеграли от тип *Riemann-Liouville*. Този подход избягва представянето на градиента чрез апроксимация

профил, което е основния недостатък на HBIM и DIM (когато имаме зададен поток на границата, т.е. задача на Нюман). Два примера демонстрират как този нов подход може да се приложи с използване на класическия HBIM [1,20] и нова версия с двойно интегриране, позната като DIM [11,21,22].

2. ИНТЕГРАЛЕН МЕТОД С ДРОБНИ ПРОИЗВОДНИ ОТ ПОРЯДЪК 1/2 : Основни съотношения (SEMI-DERIVATIVE INTEGRAL METHOD (SDIM): General relationships)

2.1. Връзка между температурата и потока на границата

Уравнение (1) може да се представи като [22]

$$\left(\frac{\partial^{1/2} \theta}{\partial t^{1/2}} - \sqrt{a} \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial^{1/2} \theta}{\partial t^{1/2}} + \sqrt{a} \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) = 0 \quad (4a)$$

$$\frac{\partial^{1/2} \theta}{\partial t^{1/2}} = \frac{1}{\Gamma(1/2)} \frac{d}{dt} \int_0^u \frac{\theta(x,t)}{\sqrt{t-u}} du - \frac{\theta(x,0)}{\sqrt{\pi t}} \quad (4b)$$

Тук $\partial^{1/2} \theta / \partial t^{1/2} = D_{RL}^{1/2}$ е дробна по време производна на Riemann-Liouville (RL) от порядък 1/2, където u е фиктивна променлива и $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$.

В уравнение (4a) само вторият множител има физичен смисъл [22]. Следователно, дробният по време еквивалент на у-ние (1) е у-ние (5a) [22], докато у-ние (5b) е връзката между функцията и градиента при $x=0$, а именно :

$$\frac{\partial^{1/2} \theta}{\partial t^{1/2}} = -\sqrt{a} \frac{\partial \theta}{\partial x} \Rightarrow \frac{\partial^{1/2} \theta(0,t)}{\partial t^{1/2}} = -\sqrt{a} \frac{\partial \theta(0,t)}{\partial x} \quad (5a,b)$$

Прилагайки оператора $D_t^{-1/2}$ към двете страни на у-ние(5b) ние получаваме у-ние (6a)

$$\theta(0,t) = -\sqrt{a} \frac{\partial^{-1/2}}{\partial t^{-1/2}} \left[\frac{\partial \theta(0,t)}{\partial x} \right] \quad (6a)$$

$$\frac{\partial^{-1/2}}{\partial t^{-1/2}} \theta(x,t) = \frac{1}{\Gamma(1/2)} \frac{\sqrt{a}}{\lambda} \int_0^t \frac{\theta(x,t)}{\sqrt{t-u}} du \quad (6b)$$

Операторът $\partial^{-1/2} \theta(x,t) / \partial t^{-1/2} = D_t^{-1/2} \theta(x,t)$ е дробен по време интеграл на Riemann-Liouville (RL) от порядък 1/2 [22]. Следвайки резултатите (6b) и тези получени в [23, 24], топлинният поток и температурата във всяка точка са свързани със следните съотношения

$$q(x,t) = \frac{\lambda}{\sqrt{\alpha}} \left[\frac{\partial^{1/2} T(x,t)}{\partial t^{1/2}} - \frac{T(x,0)}{\sqrt{\pi t}} \right] \quad (7a,b)$$

$$T(x,t) = \frac{\sqrt{\alpha}}{\lambda} \frac{\partial^{-1/2} [q(x,t)]}{\partial t^{-1/2}} + T(x,0) \quad (7b)$$

Те са еквивалентни на у-ние. (5a) и у-ние (6a), съответно

В този момент, е важно да се обърне внимание на факта, че съотношенията (6a,b) и (7a,b) са естествени решения представени чрез производни на Riemann-Liouville. Ако обаче, ние допуснем, че RL производната може механистично да се замени с производна на Caputo, като пример, т.е. зависимостта (5b) приема вида ${}^C D_t^{1/2} \theta(0,t) = -\sqrt{a} \partial \theta(0,t) / \partial x$, което е математически некоректно (виж [2], [23] и [24]). Ако, все пак, продължим в тази посока, и имаме гранични условия $\theta(0,t) = const.$, то този подход води до $\sqrt{a} \partial \theta(0,t) / \partial x = 0$. Тъй като $\sqrt{a} \neq 0$ и $q_0 \equiv \partial \theta(0,t) / \partial x$, то следва че с производна на Caputo (6a), той трябва да е нула, което е нефизичен резултат, защото според него няма проникване на топлина в средата. Следователно,

получаваме коректен математически резултат, който е физически нереален, поради механистичното заместване на производната на Riemann-Liouville с производна на Caputo.

2.2. Прилагане на SDIM към HBIM решение (SDIM-1)

С началното условие $\theta(x,0) = 0$, започвайки с интегралното съотношение на HBIM (2b) и използвайки (5b), за да се елиминира $\partial \theta(0,t) / \partial x$ (с помощта на у-ние 6a), получаваме

$$\frac{d}{dt} \int_0^x \theta(x,t) dx = \sqrt{a} \frac{\partial^{1/2} \theta(0,t)}{\partial t^{1/2}} \quad (8)$$

Уравнение (8) е основното интегрално съотношение на SDIM-1. Тъй като то е получено чрез метода на просто интегриране и има ограничения при използването му, ние ще наречем този подход SDIM-1 или прост SDIM (simple SDIM).

2.3. Прилагане на SDIM към DIM (RIM) решение (SDIM-2)

Методът SDIM-2 използва процедурата с двойно интегриране по отношение на пространствената координата x , както в класическия DIM [11,21,22], а именно:

1st интегриране

$$\int_0^x \frac{d}{dt} \theta(x,t) dx = -a \frac{\partial \theta(0,t)}{\partial x} \quad (9a)$$

2nd интегриране

$$\int_0^x \int_0^x \left[\frac{d}{dt} \theta(x,t) \right] dx = -a \theta(0,t) \quad (9b)$$

$$\frac{d}{dt} \int_0^x x \theta(x,t) dx = -a \theta(0,t) \quad (9c)$$

Дясната страна на (9с) изисква дефиниране на повърхностната температура. Когато имаме задача на Дирихле, съотношението (9с) е случаят на DIM [11]. Обаче, ако е зададен потокът на границата at $x=0$ то повърхностната температура трябва да се изрази чрез апроксимиращия профил. Това може да се избегне, ако се използват директно уравнения (5a,b). По-точно, когато е необходимо да се определи повърхностната температура, като стъпка от решението, то тя просто може да се определи с помощта на (6a): *това е втората основна стъпка на метода SDIM-2*. Накрая, използвайки (9с) и (6с), като се отчита, че $\partial\theta(0,t)/\partial x = -q_0/\lambda$, получаваме

$$\frac{d}{dt} \int_0^\delta x\theta(x,t) dx = -a\sqrt{a} \frac{\partial^{-1/2}}{\partial t^{-1/2}} \left[\frac{\partial\theta(0,t)}{\partial x} \right] \quad (10a)$$

$$\frac{d}{dt} \int_0^\delta x\theta(x,t) dx = a\sqrt{a} \frac{\partial^{-1/2}}{\partial t^{-1/2}} \left[\frac{q_0}{\lambda} \right] \quad (10b)$$

Уравнение (10b) е основното интегрално съотношение на **SDIM-2**, когато потокът е дефиниран като гранично условие.

3. МЕТОДЪТ ПРЕДСТАВЕН ЧРЕЗ ПРИМЕРИ

3.1. Пример 1:

SDIM-1 и постоянна температура

(концентрация) като гранично условие при

$$x=0$$

Точното решение на тази задача [25] е :

$$\theta_{ex} = 1 - \operatorname{erf}(\eta/2), \text{ където } \eta = x/\sqrt{at} \quad \text{е}$$

Болцмановата автомоделна променлива.

Използвайки параболичен профил

$\theta_a^T = \theta_s (1 - x/\delta)^n$ и прилагайки граничните условия на Гудман (3a,b) получаваме

$\theta_a(0,t) = \theta_s = 1$. Замествайки θ с θ_a^T в основното интегрално съотношение на **SDIM-1** (виж у-ние 8) получаваме

$$\frac{d}{dt} \int_0^\delta \left(1 - \frac{x}{\delta}\right)^n dx = \sqrt{a} \frac{D^{1/2}}{\partial t^{1/2}} C, \quad C = \text{const.} = 1 \quad (11)$$

Тъй като RL производна от константа C е $\partial^{1/2} C / \partial t^{1/2} = C / \sqrt{\pi t}$, то следва че интегрирането в (11), с начално условие $\delta(t=0) = 0$, води до следното обикновено диференциално уравнение

$$\frac{1}{n+1} \frac{d\delta}{dt} = \sqrt{a} \frac{1}{\sqrt{\pi t}} \Rightarrow \delta_r = \sqrt{at} \frac{2(n+1)}{\sqrt{\pi}} \quad (12a,b)$$

За сравнение, с класическите HBIM и DIM, при използване на същия апроксимиращ профил, и решаване на същата задача, чрез уравнение (2b) и $\partial\theta(0,t)/\partial x = -n/\delta$, резултатите са [10,11]

$$\delta_{T(HBIM)} = \sqrt{at} \sqrt{2n(n+1)} \quad (13a)$$

$$\delta_{T(DIM)} = \sqrt{at} \sqrt{(n+1)(n+2)} \quad (13b)$$

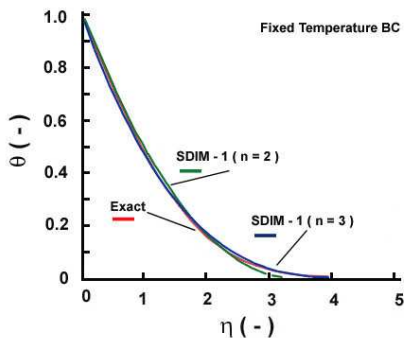
3.1.1. Точност на апроксимацията: тестове с фиксирани експоненти $n=2$ и $n=3$

Графичното представяне на Фиг.1 сочи, че профилите генерирани с решението на **SDIM-1** са практически неотличими от точното решение. Абсолютните грешки на апроксимация представени на Фиг.2 ясно показват, че решенията чрез **SDIM-1** с използване на $n=2$ или $n=3$ са по-добри (по-точни) от класическите решения чрез HBIM, а в някои случаи по-точни от решения с DIM profiles (случаят на SDIM-1 с $n=3$). Във всички случаи, решенията с използване на **SDIM-1** и фиксирани

експоненти демонстрират абсолютни грешки на апроксимация (pointwise errors) по-малки от 0.02 .

3.1.2. Точност на апроксимацията: тестове с оптимизирани експоненти

Тъй като методът представен тук, както и класическите HBIM и DIM са моментни методи, точността на апроксимация зависи от стойността на експонентата n . Недефинираната експонента е анализирана в [8] и възникналите проблеми бяха развити към определяне на оптимална стойност на n , чрез минимизиране на средноквадратичната грешка на апроксимация [10,11].

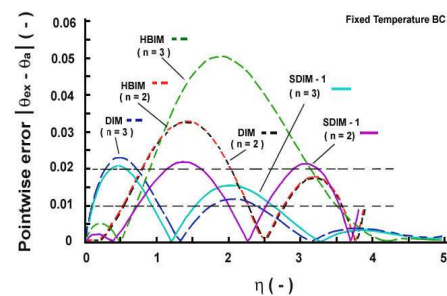


Фиг.1. Профили на SDIM-1 решения с фиксирани експоненти сравнени с точното решение.

Ние обръщаме вниманието на факта, че апроксимацията профил изпълнява условията на интегралното съотношение, а не на оригиналното дифузионно уравнение. Следователно функцията на остатъчната грешка се дефинира като

$$\varphi(u_a(x,t)) = \frac{\partial u_a}{\partial t} - a_0 \frac{\partial^2 u_a}{\partial x^2} \quad (14)$$

Функцията $\varphi(u_a(x,t))$ трябва да бъде равна на нула, ако u_a съвпада с точното решение, ако не то трябва да достигни минимум за определена стойност на n . Ние ще използваме дефиницията (14) за намиране на ограничения, които експонентата n трябва да изпълнява.



Фиг.2. Абсолютни грешки на апроксимация на интегралните SDIM-1 решения по отношение на точното решение. Плътните линии съответстват на SDIM-1 решения.

С профила $u_a = (1-x/\delta)^n$ и $x=0$ имаме $\varphi_T(0,t) = [-n(n-1)/\delta^2]$. Следователно, търсейки положителни стойности на n , дифузионното уравнение се изпълнява при $n > 1$. От друга страна, ако трябва да се изпълнят условията на Гудман $u_a(\delta,t) = \partial u_a(\delta,t)/\partial x = 0$, следва че $n > 1$. Освен това, при $x \rightarrow \delta$ получаваме

$\lim_{x \rightarrow \delta} \varphi_T(\delta,t) = [-n(n-1)/\delta^2] \lim_{x \rightarrow \delta} (1-x/\delta)^{n-2}$ и от тук следва ,че дифузионното уравнение се изпълнява при $x = \delta$ за $n > 2$. Следователно , , получаваме основното ограничение $n > 2$.

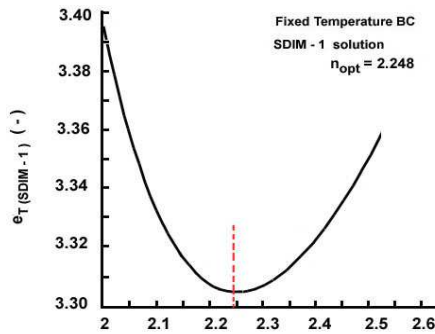
Прилагайки критерия на Langford [2] трябва да бъде изпълнено следното условие

$$E_{LT}(n,t) = \int_0^\delta \left[\frac{\partial u_a}{\partial t} - a_0 \frac{\partial^2 u_a}{\partial x^2} \right]^2 dx \rightarrow \min \quad (15)$$

Представяйки апроксимация профил $u = (1 - x/\delta)^n$ чрез координата на Zener [26] $\xi = x/\delta$, $0 < \xi < 1$ получаваме $V(\xi, t) = (1 - \xi)^n$ [10,11]. Следователно, дифузионно уравнение (1), представено в пространство на ξ -координата, приема вида

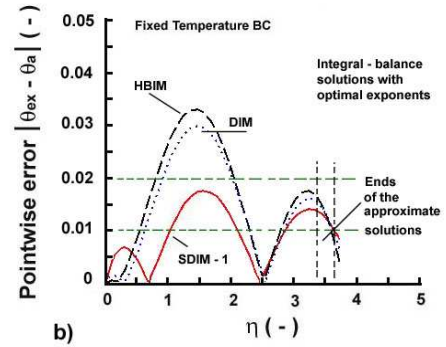
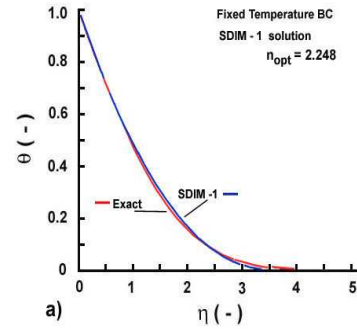
$$-\frac{d\delta}{dt} \frac{\xi}{\delta} \frac{\partial V}{\partial \xi} = a_0 \frac{\partial^2 V}{\partial \xi^2} \frac{1}{\delta^2} \quad (16)$$

По-нататък, изразът за δ_T е (12b) и производението $\delta(d\delta/dt) = 2a_0(n+1)^2/\pi$ не зависи от времето. Тогава, интегрирането от 0 до $\xi = x/\delta = 1$ позволява функцията на грешката $E_{LT}(n, t)$ да се представи като отношение $E_{LT(SDIM-1)} = e_{T(SDIM-1)}(n)/\delta^4$ [10,11]. Следователно, средноквадратичната грешка $E_{LT}(n, t)$ намалява бързо във времето и търсенето на оптимална експонента изисква минимизиране на $e_{T(SDIM-1)}(n)$ по отношение на n . Процедурата е добре описана в [10, 11] за случая линейното уравнение, а за нелинейни проблеми в [27].



Фиг.3. Графика на функцията $e_{T(SDIM-1)}(n)$ дефинираща оптималната експонента $n \approx 2.248$ SDIM-1 решение за фиксирана температура като гранично условие

Функцията $e_{T(SDIM-1)}(n)$ (виж Fig.3) има единствен реален минимум $E_{LT(SDIM-1)} \approx 0.01834$ за $n \approx 2.248$ (виж Фиг. 3). Числените симулации на точните и приближените SDIM-1 решения са



Фиг.4: а) SDIM-1 решение с оптимални експоненти сравнени с точно решения. Фиксирана температура като гранично условие

б) Абсолютни грешки на апроксимация за различни интегрални решения (с оптимални експоненти) по отношение на точното решение. Плътната линия съответства на SDIM-1 решение.

показани на Фиг. 4а.

Абсолютните грешки на решения (чрез HBIM, DIM и SDIM-1) (виж Фиг. 4b) с оптимални експоненти сочат, че SDIM-1 решението има по-голяма точност сравнена с тази

на решенията получени с **HBIM** и **DIM**. Този положителен ефект е следствие на ключовата за SDIM-1 стъпка: *избягва се представянето на пространствената производна при $x=0$ чрез апроксимация профил.*

Освен това, като очакван резултат, дълбочината на проникване съответстваща на $\theta_a = 0$, която дефинира η_{final} , с оптимална експоненти са: $\delta_{T(SDIM-1)} \approx 3.665$, $\delta_{T(HBIM)} \approx 3.475$ и $\delta_{T(DIM)} \approx 3.471$. Следователно, с SDIM-1 ние *получаваме най-дългата дълбочина на проникване, което силно влияе върху грешката на апроксимация в зоната близост до фронта на решението.*

3.1.3. Апроксимация на потока на границата (Surface flux approximation)

В допълнение, безразмерният повърхностен поток Q може да се представи като $Q = q_0 \sqrt{at} / \lambda (\theta(0, t))$. Стойности на Q определени с използване на различните интегрални решения са представени в Таблица 1. Точното решение [25] е $Q_{exact} = 1/\sqrt{\pi}$. Данните в Таблица 1 сочат, че във всички случаи приближените решения дават стойности на Q по-големи от тези изчислени с помощта на точното решение.

Q	Решения с фиксирани експоненти				Решения с оптимални експоненти		
	HBIM	DIM	SDIM-1	Exact	HBIM	DIM	SDIM-1
$n = 2$	0.577 (+0.023)	0.577 (+0.023)	0.590 (+0.046)	0.564	0.577 (+0.023)	0.586 (+0.039)	0.613 (+0.087)
$n = 3$	0.612 (+0.085)	0.670 (+0.085)	0.663 (+0.117)		$n_{opt} \approx 2.008$	$n_{opt} \approx 2.074$	$n_{opt} \approx 2.24$
Бележка: числата в скобите са грешките на апроксимация							

Таблица 1. Оценка на безразмерния повърхностен поток $Q = q_0 \sqrt{at} / \lambda \theta(0, t)$ за различни интегрални решения и фиксирана температура като гранично условие.

3.2. Пример2:

SDIM-2 и зададен поток като гранично условие при $x=0$

С гранично условие $-\lambda(\partial\theta(0, t)/\partial x) = q_0$

точното решение на (1) е [25]

$$\theta_{ex}(x, t) = 2 \frac{q_0}{\lambda} \sqrt{at} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{4at}\right) - \frac{x}{\sqrt{at}} \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{at}}\right) \right] \quad (17)$$

$$\theta_{ex}(0, t) = 2 \frac{q_0}{\lambda} \frac{\sqrt{at}}{\sqrt{\pi}} \approx 1.1283 \frac{q_0}{\lambda} \sqrt{at} \quad (18)$$

Класическият **HBIM** (виж у-ние 2b) изисква в дясната страна да се дефинира градиентът при $x=0$. В този случай не е нужно допълнително рафиниране на метода, защото граничното условие е $(\partial\theta(0,t)/\partial x) = q_0/\lambda$. Следователно резултатът е $\delta_{q(\text{HBIM})} = \sqrt{at}\sqrt{n(n+1)}$ [10,16].

Поради тази причина, по-голямо предизвикателство е да се види как решението чрез DIM може да бъде подобро използвайки подхода **SDIM-2**.

С апроксимиращия профил $\theta_a^q = \theta_s^q (1-x/\delta)^n$ и граничните условия (3a,b) се получава

$$\theta_a^q = \frac{q_0}{\lambda} \frac{\delta}{n} \left(1 - \frac{x}{\delta}\right)^n \quad (19)$$

След това, резултатът на класическото DIM решение е [10, 11]

$$\begin{aligned} \frac{1}{n(n+1)(n+2)} \frac{d\delta^3}{dt} &= a \frac{\delta}{n} \Rightarrow \\ \Rightarrow \delta_{q(\text{DIM})} &= \sqrt{at} \sqrt{(n+1)(n+2)} \frac{2}{3} \end{aligned} \quad (20a,b)$$

Ако обаче, се избегне използването на апроксимиращия профил за определяне на повърхностната температура в дясната част на интегралното решение, тогава следвайки уравнението на SDIM-2 (10b) имаме

$$\frac{d}{dt} \int_0^\delta \frac{q_0}{\lambda} x \frac{\delta}{n} \left(1 - \frac{x}{\delta}\right)^n dx = a \sqrt{a} \frac{D^{-1/2}}{\partial t^{-1/2}} \left(\frac{q_0}{\lambda}\right) \quad (21a)$$

Следователно, от (21a) получаваме

$$\frac{1}{n(n+1)(n+2)} \frac{d\delta^3}{dt} = a^{\frac{3}{2}} \frac{2\sqrt{t}}{\sqrt{\pi}} \quad (22a)$$

$$\delta_q^{s2} = \sqrt{at} F_{s2}(n) \quad (22b)$$

Освен това, апроксимиращият профил, представен чрез автомоделната променлива η , е $\Theta_a^q(\eta) = (\theta_a^q(\eta) \lambda / q_0 \sqrt{at})$, което позволява да се сравни с точното решение. В този случай имаме $\Theta_a(\eta) = (F_s(n)/n)(1-\eta/F_s(n))^n$.

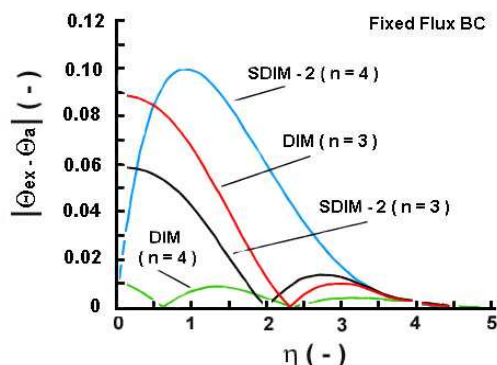
3.2.1. Точност на апроксимацията: тестове с фиксирани експоненти

Тестове, демонстриращи абсолютните грешки на **SDIM-2** решения с фиксирани експоненти, а също така и тези получени с класическите интегрални решения [1,16] са представени Фиг.5. Числените експерименти са проведени с $n=3$ и $n=4$ защото оптималните експоненти (дискутирани в следващата точка) са между тези две цели стойности. Ние не показваме графиките на приближените решения, защото са неразличими визуално от точните и затова се фокусираме върху грешките на апроксимация. Абсолютните грешки (виж Фиг.5) сочат, че най-добра стойност се получава с **DIM** решение и $n=4$ в целият диапазон на промяна на η . Потошно, за решението чрез **SDIM-2** както с $n=3$ та и с $n=4$, приемливата грешка е в диапазона $2.5 < \eta < 4.5$, но и в двата случая резултатът за повърхностната температура е неприемлив.

3.2.2. Точност на апроксимацията: тестове с оптимизирани експоненти

Аналогично на **Пример 1**, функцията на остатъчната грешка може да се конструира и за случая на зададен поток като гранично условие. Ние прескачаме детайлите в изразите на тази функция, тъй като те могат да бъдат видяни в [11,

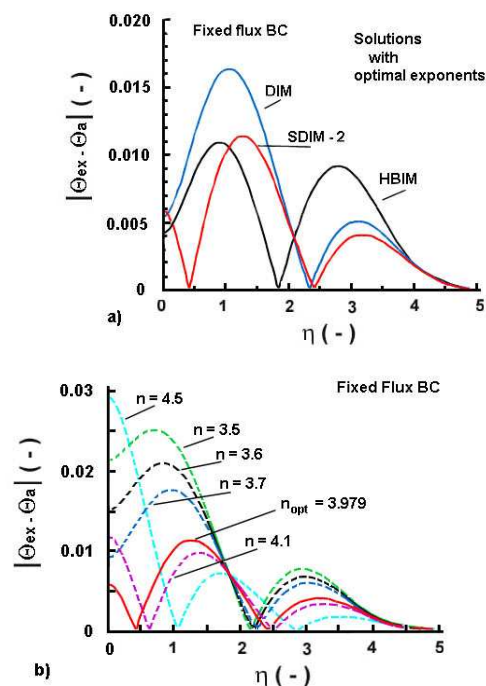
27, 28]. Минимизацията на средноквадратичната грешка представена като $E_{LQ}(n, t) = e_{LQ}(n) / \delta^4$ за цялата дълбочина на дифузионния слой води до $n_{SDIM-2}(opt) \approx 3.979$ и $E_{LQ}(n) \approx 0.0257$. В същото време, оптималните експоненти за решенията чрез **HBIM** и **DIM**, за същия проблем, са $n_{HBIM}^q(opt) \approx 3.535$ и $n_{DIM}^q(opt) \approx 3.798$. Това са очаквани разлики защото безразмерната функция $F_n(n)$, която е множител на *характеристичната дължина* $\sqrt{at}$ зависи от използваната техника на интегриране.



Фиг.5. Абсолютни грешки на интегрални решение получени чрез различни техники на интегриране и фиксирани експоненти на профила

Графиките на Фиг.6а сочат, че **SDIM-2** решението е по-добро от това получено с **DIM**. Тъй като **HBIM** е по-коректния подход в сравнение с DIM, както беше коментирано по-горе, фактът, че **SDIM-2** решението е сравнимо с това на **HBIM** потвърждава допълнително адекватността на използвания тук модифициран метод. Когато експонентата на решението чрез **SDIM-2** варира около $n_{SDIM-2}(opt) \approx 3.979$, както това е показано на Фиг.6b. За $n < 3.979$

решенията имат приемливи грешки на апроксимация когато $\eta < 2$, но за големи стойности на η по-добра точност се достига когато се използва оптималната експонента. Аналогично, за $n > 3.979$ лоша апроксимация се получава за $\eta < 1$, докато точности по-добри от тези с оптималното решение се достигат за големи стойности на η . В допълнение, дълбочините на проникване съответстващи на $\theta_a^q = 0$, т.е. за η_{final} , с оптимални експонати са: $\delta_{q(SDIM-2)} \approx 4.4666$, $\delta_{q(HBIM)} \approx 4.0039$ и $\delta_{q(DIM)} \approx 4.3064$.



Фиг.6. Абсолютни грешки на интегрални решения с оптимални експоненти на апроксимация параболчен профил

- Сравнение на HBIM, DIM и SFIM-2
- Сравнение на абсолютните грешки на решения с SDIM-2, когато експонентата варира около оптималната стойност.

Следователно, с използване на **SDIM-2** получаваме най-голямата дълбочина на проникване, което влияе съществено върху грешката на апроксимация в близост до фронта на решението.

3.2.3. Апроксимация на повърхностната температура

Като следваща стъпка за оценка на приложимостта на метода, безизмерната

повърхностна температура Θ_s може да се представи като $\Theta_s = \lambda \theta(0, t) / q_0 \sqrt{at}$. Следователно, ние можем да определим стойности на Θ получени чрез различни техники на интегриране (виж Таблица 2). Точното решение [25] е $Q_{s-exact} = 2/\sqrt{\pi}$

Таблица 2. Оценка на безразмерната повърхностна температура $\Theta = \lambda \theta(0, t) / q_0 \sqrt{at}$ за различни техники на интегриране и постоянен поток като гранично условие

Θ	HBIM	DIM	SDIM-2	Exact	HBIM	DIM	SDIM-2
	Solutions with stipulated exponents			1.128	Solutions with optimal exponents		
$n = 3$	1.154 (+ 0.089)	1.217 (+ 0.089)	1.186 (- 0.094)		1.132 (- 0.004)	1.133 (- 0.005)	1.122 (+ 0.006)
$n = 4$	1.118 (-0.010)	1.118 (- 0.01)	1.121 (+ 0.05)		$n_{opt} \approx 3.563$	$n_{opt} \approx 3.798$	$n_{opt} \approx 3.979$
Бележка: числата в скобите са грешките на апроксимация							

Данните в Таблица 2 (колоните вляво от точните решения) сочат за по-добра апроксимация чрез решението на **HBIM**, което потвърждава по-ранните коментари по този въпрос. По-нататък, използвайки оптималните експоненти, решението на **SDIM-2** дава стойности на повърхностната температура надвишаващи тези на точното решение, докато тези определени **HBIM** и **DIM** са по-ниски от точните стойности. Независимо от това, грешките на апроксимация са от един и същи порядък.

4. КРАТЪК АНАЛИЗ НА ПРЕДЛОЖЕНИЯ МЕТОД И ИЗВОДИ

В края на тази глава ние отбелязваме основните моменти на новото решение, а именно:

- Примерите демонстрират нов подход за решение на нестационарна дифузия (топлопроводност) с използване на интегралния метод на Гудман, където основната стъпка е използване на дробна по време производна на Riemann-Liouville, за свързване на топлинния поток и повърхностната температура на границата ($x = 0$) от нагриваната среда.

- Гледайки по-прецизно на използваните до този момент интеграционни техники за метода на Гудман (коментирани във Въведение) ние можем да дефинираме две основни групи:

- 1) **Метод с едно уравнение (Single equation approach).** Това всъщност е класическия метод на Гудман HBIM представен с уравнение (2b). Основният проблем възникващ при използване на уравнение (4) е че градиентът при $x=0$ трябва да се представи чрез предетерминирания апроксимиращ профил. Този основен недостатък на HBIM може да се избегне чрез метода на двойно интегриране (DIM) водещ до уравнение (9c). Въпреки това, при използване на DIM ние срещаме същия проблем, когато потокът е зададен като граничното условие за $x=0$. В този момент, ние искаме специално да отбележим, че *уравнения (2) and (4) представят нулевият момент на уравнение (1), докато лявата страна на уравнението на DIM (виж у-ние 9c) е първият момент на θ*
- 2) **Метод с две уравнения (Two equations approach).** Философията на тези решения използва *нулевият момент* представен чрез уравнение (2b) (виж също у-ние 23a) и моментно по тип уравнение (a *moment-like equation*) (получено чрез

умножаване на у-ние (1) с θ и интегриране по цялата дълбочина на слоя (виж у-ние 23b), а именно

$$\int_0^\delta \frac{\partial \theta}{\partial t} dx = a \int_0^\delta \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} dx \quad (23a)$$

$$\int_0^\delta \theta \frac{\partial \theta}{\partial t} dx = a \int_0^\delta \theta \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} dx \quad (23b)$$

Използвайки апроксимиращия профил, чрез интегралните съотношения (23a) и (23b), съвместното им решение води до система от две уравнения с две неизвестни (*a set of two equations with two unknowns*): дълбочина на проникване δ и градиента $\partial \theta(0,t)/\partial x$. Класически примери за използване на този подход са задачите решени от Zien [29,30], независимо от факта, че те използват апроксимиращ профил различен от този в тази глава.

Тогава, естествения въпрос е: Към коя група принадлежи разработения метод **SDIM**? Определено, предложеният метод **SDIM** използва две уравнения (*a two-equation method*). *Първото уравнение е или класическото съотношение на HBIM (нулев момент) или това на DIM (първи момент).* Второто уравнение е **(6a) свързващо потока и температурата във всяка точка на средата; то специално се използва на границата $x=0$** (виж у-ние 6b). Този момент е основен в решенията чрез SDIM, защото използването на апроксимиращия профил за изразяване на десните части на интегралните съотношения напълно се избягва.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Goodman, T.R, The heat balance integral and its application to problems involving a change of

- phase, Transactions of ASME, 80 (1958), 1-2, pp.335-342.
- [2] Langford, D., The heat balance integral method, Int. J. Heat Mass Transfer, 16 (1973), 12, pp.2424-2428.
- [3] Thulin, D., Solutions apporimatives de l'equation de diffusion thermique, Int. J. Heat Mass Transfer, 17 (1974), 4, pp. 497-503.
- [4] Wood, A.S., Kutluay, S., A heat balance integral model of the thermistor, Int. J. Heat Mass Transfer, 38 (1995), 10, pp. 1831-1840.
- [5] Moghtaderi, B., Novozhilov, V., Fletcher, D., Kent, J.H., An integral model for transient pyrolysis of solid materials, Fire and Materials, 21, (1997), 1, pp. 7-16.
- [6] Staggs, J.K.J., Approximate solutions for the pyrolysis of char forming and filled polymers under thermally thick conditions, Fire and Materials, 24 (2000), 6, pp.305-308.
- [7] Kutluay, S., Wood, A.S., Esen, A., A heat balance integral solution of the thermistor problem with a modified electrical conductivity, Applied Mathematical Modelling, 30 (2006), 4, pp. 386-394
- [8] Hristov, J.Y., An Inverse Stefan Problem Relevant to Boilover: Heat Balance Integral Solutions and Analysis, Thermal Science, 11 (2007), 2, pp. 141-160.
- [9] Wood, A.S., A new look at the heat balance integral method, Appl. Math. Model., 25, (2001), 10, pp. 815-824.
- [10] Myers, J.G. Optimizing the exponent in the heat balance and refined integral methods. Int Comm Heat Mass Transfer 36 (2009), 2, pp. 143-147
- [11] Mitchell, S. L., Myers, T. G. Application of standard and refined heat balance integral methods to one-dimensional Stefan problems. SIAM Review 52 (2010), 1, pp. 57-86
- [12] Mosally, F., Wood, A.S., Al-Fhaid, A., On the convergence of the heat balance integral method, Appl. Math. Model., 29, (2005), 10, pp. 903-912.
- [13] Braga, W., Mantelli, M., A new approach for the heat balance integral method applied to heat conduction problems, 38th AIAA Thermophysics Conference, Toronto, Ontario, June 6-9, 2005, paper AIAA-2005- 4686.
- [14] Theuns, E., Merci, B., Vierendeels, Vandevelde, P., Critical evaluation of an integral model for the pyrolysis of charring materials, Fire Safety Journal, 40 (2005), 2, pp.121-140.
- [15] Sahu, S.K., Das, P.K., Bhattacharyya, S., A comprehensive analysis of conduction-controlled rewetting by the Heat balance Integral Method, Int. J. Heat Mass Transfer, 49, (2006), 25-26, pp.4978-4986.
- [16] Hristov J (2009) The heat-balance integral method by a parabolic profile with unspecified exponent: Analysis and Benchmark Exercises. Thermal Science 13(2009), 2, pp.27-48
- [17] Roday, A.P., Kazmierczak MJ (2009) Analysis of phase-change in finite slabs subjected to convective boundary conditions: Part I – Melting. Int Rev Chem Eng 1 (2009), 1, pp. 87–99
- [18] Roday, A.P., Kazmierczak MJ (2009) Analysis of phase-change in finite slabs subjected to convective boundary conditions: Part II – Freezing. Int Rev Chem Eng 1 (2009), 1, pp. 100–108
- [19] Hristov, J. The Heat-Balance Integral: 1. How to Calibrate the Parabolic Profile? Comptes Rendues Mechanique, 340 (2012), 7, pp. 485-492
- [20] Goodman T.R., Application of Integral Methods to Transient Nonlinear Heat Transfer, *Advances in Heat Transfer*, T. F. Irvine and J. P. Hartnett, eds., 1 (1964), Academic Press, San Diego, CA, pp. 51–122.
- [21] Volkov, V. N., Li-Orlov, V. K., A Refinement of the Integral Method in Solving the Heat Conduction Equation, *Heat Transfer Sov. Res.*, 2 (1970), 2, pp. 41-47.
- [22] Sadoun N, Si-Ahmed EK, Colinet P (2006) On the refined integral method for the one-phase Stefan problem with time-dependent boundary conditions. Appl Math Model 30: 531–544
- [22] Oldham, K.B., Spanier, J., The Fractional calculus, Academic Press, New York, 1974.
- [23] Kulish, V.V., Lage, J.L. Fractional-diffusion solutions for transient local temperature and heat flux, *J. Heat Transfer*, 122 (2000) 372-376.
- [24] Agrawal, O.P., Application of Fractional Derivatives in Thermal Analysis of Disk Brakes, *Nonlinear Dynamics*, 38(2004) 191–206.
- [25] Carslaw, H.S., Jaeger, J.C., *Conduction of Heat in Solids*. Oxford University Press, London, 1959.
- [26] Zener C., Theory of growth of spherical precipitates from solid solutions. J Appl Phys 20 (1949), 10, pp. 950-953
- [27] Hristov J., Integral solutions to transient nonlinear heat (mass) diffusion with a power-law diffusivity: a semi-infinite medium with fixed boundary conditions, *Heat Mass Transfer*, in press, DOI: 10.1007/s00231-015-1579-2
- [28] Mitchell, S.L., Myers, T.G., Application of heat balance integral methods to one-dimensional phase change problems, Int. J. Diff. Eqs., volume 2012, Article ID 187902, doi: 10.1155/2012/187902.
- [29] Zien, T.-F., Approximate calculation of transient heat conduction, AIAA J., 14 (1976), 3, pp. 404-406.
- [30] Zien, T.-F., Integral solutions of ablation problems with time-dependent heat flux, AIAA J., 14 (1978), 12, pp. 1287–1295.

ГЛАВА 1.6

МЕТОД НА ИНТЕГРАЛНИЯ БАЛАНС С МНОГОКРАТНО ИНТЕГРИРАНЕ*:

Основна идея и пример с линейното уравнение на Mullins

Предложен е метод с многократно интегриране позволяващ принципа на интегралния баланс да се прилага за дифузионни уравнения от висок порядък. Новият метод, наречен Многократно Интегриращ Метод (Multiple-integral balance method, MIM), се основава на многократно интегрираща процедура по отношение на пространствената променлива и представлява генерализиране на широко използвания метод на топлинния баланс на Goodman и на метода с двойно интегриране на Volkov. Методът е демонстриран чрез решение на линейния дифузионен модел на Mullins за термично набраздяване (thermal grooving) в метали.

1. ВЪВЕДЕНИЕ

Прилагането на метода на интегралния баланс [1,2] към дифузионни модели на пренос на топлина и маса използва принципа на крайна дълбочина на проникване на дифузанта и формирането на рязък фронт на движение на решението. Решенията с интегралните методи са широко прилагани [3,4] и все още привлекателни за решаване на нелинейни дифузионни задачи [4-8]. Тази глава представя идеята за метод с многократно интегриране (*Multiple-Integral Method, MIM*), който може да се разглежда като обобщение на метода на интегралния баланс на

Goodman [1] и на метода с двойно интегриране (Double-Integration Method) на Volkov [9].

2. МЕТОД С МНОГОКРАТНО ИНТЕГРИРАНЕ (MIM): Дефиниции

За да представим основната идея на метода, нека разгледаме линейното дифузионно уравнение от порядък p

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = b \frac{\partial^p \theta}{\partial x^p}, \quad b > 0, \quad p \geq 2 \quad (1)$$

2.1. Дефиниция на оператора с многократно интегриране L_k

Методът с многократно интегриране използва прилагане на оператора L_k върху дифузионно уравнение от порядък p дефиниран като (The multiple-integration method suggests applying the operator L_k , on a diffusion equation of order p defined as) (и след прилагане на правилото на Leibnitz – виж уравнения 2 и 3),
а именно

* Публикувано като: Hristov J., Multiple integral-balance method: Basic idea and an example with Mullins model of thermal grooving, *Thermal Science*, 21 (2017), pp. 1555-1560, DOI:10.2298/TSCI170410124H

$$\underbrace{\int_0^\delta \left\{ \int_0^\delta \int_0^\delta \frac{\partial}{\partial t} \theta(x,t) dx dx dx \right\}}_{k-1} dx = \underbrace{\int_0^\delta \left\{ \int_0^\delta \int_0^\delta \left[b \frac{\partial^p}{\partial x^p} \theta(x,t) \right] dx dx dx \right\}}_{k-1} dx \quad (2a)$$

След прилагане на правилото на Leibnitz – виж уравнения (2) и (3) получаваме

$$\frac{d}{dt} \underbrace{\int_0^\delta \left\{ \int_0^\delta \int_0^\delta \theta(x,t) dx dx dx \right\}}_{k-1} dx = \underbrace{\int_0^\delta \left\{ \int_0^\delta \int_0^\delta \left[b \frac{\partial^p}{\partial x^p} \theta(x,t) \right] dx dx dx \right\}}_{k-1} dx \quad (2b)$$

Следователно, ние трябва да направим $k-1$ интегрирания от x до δ и последната операция (k^{th} интегриране) трябва да бъде от 0 до δ .

Сега, прилагайки L_k към модела (1), с помощта на правилото на Leibnitz, получаваме (2).

Броят на интегриранията, които трябва да се приложат към (2), зависи от порядъка на дифузионния член p : основното правило е $k = p$.

Обаче, ако имаме случай на $k \leq p$, то се получава, че

$$\underbrace{\int_0^\delta \left\{ \int_0^\delta \int_0^\delta \left[b \frac{\partial^p}{\partial x^p} \theta(x,t) \right] dx dx dx \right\}}_{k-1} dx = b \frac{\partial^{p-k}}{\partial x^{p-k}} \theta(0,t) \quad (3)$$

Следователно, съгласно (3), ако $k=1$ и $p=2$, то ние получаваме интегралната зависимост на НВІМ. По-нататък, за $k=p=2$ ние директно получаваме формулировката на DIM.

4. МІМ ПРИЛОЖЕН КЪМ УРАВНЕНИЕТО НА MULLINS ЗА ТЕРМИЧНО НАБРАЗДЯВАНЕ

4.1. Дифузионен модел на Mullins

В процесите на нарастване на браздите между зърната в метали, чрез механизъм на изпарение-кондензация, профилът на повърхността на браздата, се моделира чрез следното дифузионно уравнение (с начални и гранични условия) [11,12]

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \left[\frac{D(0)}{1 + (\partial u / \partial x)^2} \right] \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (4a)$$

$$\frac{\partial u(0,t)}{\partial x} = u_0 = \text{const.}, \quad \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} \rightarrow 0 \text{ за } x \rightarrow \infty,$$

$$u(x,0) = 0 \quad (4b,c)$$

С допускането на симетричен профил на браздата по отношение на началото $x=0$, задачата може да се разглежда само по отношение на по-пространството $x \geq 0$ (виж Фиг.1а). Нелинейният модел (4) е решаван точно от Broadbridge [12,13] и други автори [14,15], но решенията са трудни за физичен анализ. При малки кривини на повърхността и допускането, че повърхностната дифузия е основен механизъм на масопренос, уравнение (4a) може да се линеаризира до [11,12]

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -B \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}, \quad \frac{\partial u(0,t)}{\partial x} = m, \quad m > 0, \quad \frac{\partial^3 u(0,t)}{\partial x^3} = 0$$

(5a,b,c)

В уравнение (5b) дифузионният коефициент се дефинира като $B = D_s \gamma \Omega^2 \nu / kT$, където: D_s е коефициент на повърхностна дифузия; γ е свободната повърхностна енергия за единица площ; Ω е молекулярния обем; ν е площта върху която протича процеса на дифузия. Условието (5c) за $x = 0$ съответства на изискването потокът да бъде равен на нула в началото на координатната система [10,14]. Моделът представен чрез уравнение (5a) ще бъде използвано за демонстриране на технологията на ММ.

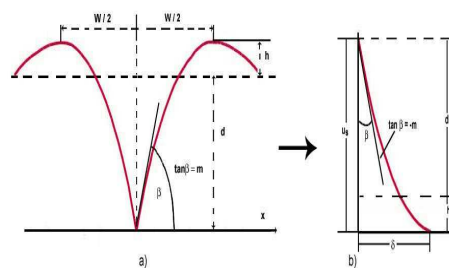
4.2. Решение чрез ММ

За да направим решението по-разбираемо и близко до това на известните задачи за нестационарна дифузия, ние обръщаме профила (we invert the *profile of the groove*) от оригиналната дефиниция с положителна кривина на повърхността (with a *positive curvature*) (виж Фиг. 1b) в огледален профил (a *mirror profile*) с отрицателна кривина на повърхността (with a *negative curvature*) (виж Фиг. 1a).

Обърнатият профил на браздата наподобява намаляващия температурен (концентрационен) профил за задача на Нюман, където граничното условие е $u_x(0,t) = -m$ (знакът в уравнение (5b) се сменя, понеже кривината на инвертирания профил е отрицателна) и дифузионният коефициент в уравнение (5a) се променя от $-B$ в B , а уравнението се трансформира в модела (1) за $p = 4$.

Интегралният метод, като основно правило, изисква апроксимиращия профил да изпълнява граничните условия на двата края (границы) на дифузионния слой. Тук е използван апроксимиращ параболичен профил с недефинирана експонента [3,4,5,6,7] дефиниран като $u_a = u_s (1 - x/\delta)^n$. Основно предимство на този профил е свободата за оптимизиране на точността на апроксимация чрез средноквадратичната грешка на апроксимираното моделно уравнение (there is a freedom to optimize the accuracy of approximation by the mean squared error of approximation of the governing equation) [4,6,7,11].

Сега, прилагайки граничното условие (5b) ние можем да дефинираме, че $u_s = u_a(0,t) = m(\delta/n)$, както в класическата задача на Нюман, решена с помощта на НВМ и DIM [3,4]. При използване на новата дефиниция имаме, че $u_s = d + h$ е дълбочината на браздата, докато δ е равна на половината от ширината на браздата ($\delta = w/2$) от оста на симетрия до инфлексната точка (виж Фиг.1a и Фиг.1b), където се изпълняват следните гранични условия $u_x(\delta) = u_{xx}(\delta) = u_{xxx}(\delta) = 0$.



Фиг.1. Схема на реалния профил на браздата (a) и на инвертирания (огледален) профил (b) използван при решението чрез ММ

Означавайки $z = x/\delta$, областта с подвижна граница $0 \leq x \leq \delta$ се трансформира в такава с неподвижни координати на Zener $0 \leq z \leq 1$. След това, сменяйки променливите в интегралите от лявата страна на уравнение (2) ние имаме за $k = 4$ (дефинирано от порядъка на производната в дясната страна на уравнение 4a) средното интегрално сътворение

$$\frac{d}{dt} \int_0^1 \delta^5 \left(\frac{m}{n} \right) \left\{ \int_z^1 \int_z^1 \int_z^1 [z(1-z)^n] dz dz dz \right\} dz = mBu(0, t) \quad (6a)$$

$$\frac{d}{dt} \delta^5 = B\delta \frac{N_4}{n} \quad (6b)$$

$$N_4 = n(n+1)(n+2)(n+3)(n+4) = \frac{(n+5)!}{n!} = \frac{\Gamma(n+5)}{\Gamma(n)}, \quad k = 4$$

Решението на уравнение (6b) с начално условие $\delta(t=0) = 0$ е

$$\delta = (Bt)^{1/4} M_4^{1/4} \quad (6c)$$

където $M_4 = N_4/n = [\Gamma(n+5)/\Gamma(n+1)]$.

Следователно, профила на повърхността на браздата може да се апроксимира като

$$u_a(x, t) = \frac{m}{n} (Bt)^{1/4} M_4^{1/4} \left(1 - \frac{x}{(Bt)^{1/4} M_4^{1/4}} \right)^n \quad (7a)$$

или алтернативно (като нормализиран профил)

$$U_a = \frac{u_a}{m(Bt)^{1/4}} = \frac{M_4^{1/4}}{n} \left(1 - \frac{x}{(Bt)^{1/4} M_4^{1/4}} \right)^n \quad (7b)$$

Нормализираният профил U_a е представен по начин аналогичен на този използван от Mullins [11] (виж уравнение 9) и по своята форма наподобява интегралното решение на класическата задача на Нюман, когато $p = 2$. За $x = 0$ ние получаваме временното развитие на

дълбочината на браздата, която в оригиналната конфигурация (виж Фиг. 2) трябва да бъде $u_s = -(m/n)(Bt)^{1/4} M_4^{1/4}$.

Средноквадратичното преместване $\langle x^2 \rangle$ на дифузионния процес се дефинира като

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^\infty xu(x, t) dx \quad (8)$$

С използване на апроксимиращия профил $u_a = u_s(1-x/\delta)^n$ и горна граница на интеграла дефинирана като δ ние получаваме, че $\langle x^2 \rangle \equiv \delta^2$ [14,15]. От решението получено по-горе следва, че $\delta^2 \equiv t^{1/2}$, което веднага ни информира, че процесът на повърхностната дифузия, моделиран чрез уравнение (5), е субдифузионен по природа, както е изследван в [16].

Приближеното решение (11) дефинира, по естествен път, не-Болцманова променлива $\eta_M = x/(Bt)^{1/4}$. Тази автомоделна променлива е използвана също от Mullins [11] за да трансформира уравнение (6a) в обикновено диференциално уравнение. Решението на това трансформирано уравнение е анализирано в [14], но основният му недостатък е, че трудно може да се използва да инженерни приложения и физичен анализ. Mullins [10] представя приближено решение чрез ред по степени на η_M , а именно

$$u(x, t) = m(Bt)^{1/4} \sum_i a_i (\eta_M)^i \Rightarrow U(x, t) = \sum_i a_i (\eta_M)^i \quad (9a)$$

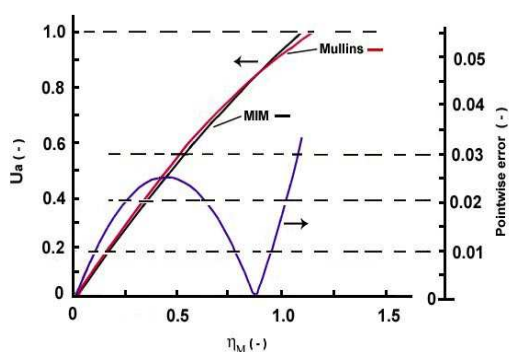
$$U(x, t) = u(x, t) / [m(Bt)^{1/4}] \quad (9b)$$

Решението е проведено за вариации на m от $m = 0$ до $m = 4$, приемайки във всички случаи $(Bt)^{1/4} = 1$ (sic!) и представяйки профилът по

отношение на пространствената променлива x чрез 16 члена от (9) (виж Таблица 1 в [11]).

Експонентата n на приближеното решение (7a,b) може лесно да се определи чрез метода на най-малките квадрати минимизиращ функцията на остатъчната грешка на уравнение (9), когато $u(x,t)$ се замести с u_a . Следователно, $R = (u_a)_t - B(u_a)_{xxx}$ трябва да се минимизира по отношение на n , което на практика означава прилагане на критерия на Langford за метода на интегралния баланс [2]. Детайли за оптимизационната процедура, прилагана като правило за този метод след 2009 [3,4,6] са добре описани в [3,4,5,6,7].

Тъй като параметърът m е множител на приближеното решение, но не се влияе върху функционалната дефиниция δ , то следва, че минимизацията на остатъчната грешка на апроксимация R е независима от m . В този контекст, важно е да се отбележи, че за да имаме валидно решение при $x \rightarrow \delta$ е наложително да се изпълнява условието $n > 4$, както и в случая на $p = 2$ (виж у-ние.1), където изискването е $n > 2$ [6,7].



Фиг.2. Приблизени решения : Решение на Mullins, решение чрез MIM и абсолютни грешки на апроксимация

Настоящото изследване установи оптимална стойност на експонентата $n_{opt} \approx 4.55$.

Приближеното решение получено чрез MIM (у-ние. 7) и решението на Mullins (у-ние.9) са представени на Фиг 2. Ясно е, че решението получено чрез MIM, сравнено с решението на Mullins, демонстрира грешка, която е типична за интегралните решения, а по точно в границите $2 \div 3\%$ [6,7]. Освен това, MIM, като метод използващ принципа на интегралния баланс с крайна дълбочина на проникване, "работи" само в границите $0 \leq x \leq \delta$, което е еквивалентно на $0 \leq \eta_M \leq [(Bt)M_4]^{1/4}$.

ИЗВОДИ

Тази глава представя идеята за нов метод на интегралния баланс наречен **Метод с Многократно Интегриране (Multiple Integral-balance Method, MIM)**.

MIM е генерализация на съществуващия метод на Интегралния топлинен баланс (Heat-balance integral) на Гудман и на метода с двойно интегриране (Double integration method) на Волков.

Методът позволява да се решават дифузионни уравнения от висок порядък. Решението на линейното уравнение на Mullins, за термично развитие на бразди в метали, е една добра демонстрация на неговите възможности, за решаване на проблеми над границите дефинирани от класическите дифузионни модели.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Goodman, T.R, The heat balance integral and its application to problems involving a change of phase, *Transactions of ASME*, 80 (1958), 1-2, pp.335-342.
- [2] Langford, D., The heat balance integral method, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 16 (1973), 12, pp.2424-2428.
- [3] Myers, J.G. Optimizing the exponent in the heat balance and refined integral methods, *Int. Comm. Heat-Mass Transfer*, 36 (2009), 2, pp. 143-147.
- [4] Mitchell, S. L., Myers, T. G. Application of standard and refined heat balance integral

- methods to one-dimensional Stefan problems. *SIAM Review* 52 (2010) ,1, pp. 57–86.
- [5] Hristov J (2009) The heat-balance integral method by a parabolic profile with unspecified exponent: Analysis and Benchmark Exercises, *Thermal Science* 13 (2009) , 2, pp.27-48.
- [6] Hristov J., Integral solutions to transient nonlinear heat (mass) diffusion with a power-law diffusivity: a semi-infinite medium with fixed boundary conditions, *Heat Mass Transfer*, pp.635-655, DOI: 10.1007/s00231-015-1579-2.
- [7] Hristov J., Double Integral-Balance Method to the Fractional Subdiffusion Equation: Approximate solutions, optimization problems to be resolved and numerical simulations, *J. Vibration and Control*, in press (December 2015);DOI: 10.1177/1077546315622773
- [8] Volkov, V. N., Li-Orlov, V. K., A Refinement of the Integral Method in Solving the Heat Conduction Equation, *Heat Transfer Sov. Res.*, 2 (1970), 2, pp. 41-47.
- [9] J. A. Esfahani, S. M. M. Khazeni , S. Mhammedi ,Accuracy analysis of predicted velocity profiles of laminar duct flow with entropy generation method , *J.Appl. Math. Mech.*, 34, (2013),8, pp.971-985
- [10] Kot, V.A. Method of boundary characteristics, *J. Eng. Phys. ThermoPhys.*, 88(2015),6, pp. 1390-1408.
- [11] Mullins, W.W. Theory of thermal grooving, *J. Appl. Phys*, 28 91957), 3, pp.333-339.
- [12] P. Broadbridge, Exact solvability of the Mullins nonlinear diffusion model of groove development, *J. Math. Phys*, 30 (1989), 7,pp.1648-1651.
- [13] P. Broadbridge, Exact solution of a degenerate fully nonlinear diffusion equation, *Z.angw.Math.Phys*, 55 92004), pp.534-538. doi:10.1007/s00033-004-3015-1
- [14] Kitada, A. On properties of a classical solution of nonlinear mass transport equation $u_t = u_{xx}/(1+u_x^2)$, *J. Math. Phys*, 27 (1986), 7,pp.1391-1392.
- [15] Robertson, Grain-boundary growing by surface diffusion for finite slopes, *J. Appl. Phys*, 42 (1971), 1, pp.463-467.
- [16] M. Abu Hamed, A.A. Nepomnyashchy, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 298–299 (2015),1,pp. 42-47

ГЛАВА 1.7

ИНТЕГРАЛЕН ПОДХОД КЪМ НЕЛИНЕЙНИЯ МОДЕЛ НА MULLINS*

Предложено е интегрално решение на нелинейния модел на Mullins за термично набраздяване. Успешното прилагане на метода на интегралния баланс е възможно след нелинейната трансформация на дифузионния член. Трансформацията на Broadbridge преобразува уравнението на Mullins в задача на Dirichlet за нелинейно уравнение с нелинейност на Fujita в коефициента на дифузия. Решението е директно, но изисква допълнителна оптимизация за определяне на експонентата на апроксимиращия обобщен параболичен профил.

1. ВЪВЕДЕНИЕ

1.1. Модел на Mullins за термично набраздяване

Образуването на бразди по повърхността на металите, чрез механизъм на изпарение-кондензация, се моделира с нелинейното уравнение на Mullins equation [1,2,3]

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \left[\frac{D(0)}{1 + (\partial u / \partial x)^2} \right] \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (1)$$

с начални и гранични условия [1]

$$u_x(0, t) = \text{const.} \quad u(x, 0) = 0, \quad u(\infty, 0) = 0$$

$$u_x(\infty, t) = 0 \quad (2)$$

$$u_x(0, t) = m, \quad u(\infty, t) = u_{xx}(0, t) = u_{xxx}(0, t) = 0 \quad (3)$$

Граничното условие при $x = 0$, всъщност, съответствува на физическото условие потокът на парите да бъде равен на нула в

основата (началото) на каверната (браздата) [1,2,3].

Моделът на Mullins разглежда симетрична каверна (по отношение на вертикалната ос и $x = 0$). Поради тази симетрия ние разглеждаме само половината профил за $x \geq 0$ (виж Фиг.1). Моделът (1)-(3) е изследван и анализиран от редица автори [2,3,4,5,6]. В допълнение, когато кривината на повърхността е малка (за $(u_x)^2 \ll 1$) е възможна линеаризация на модела (1) като дифузионно уравнение от четвърти ред [1] отчитащо формирането на браздата чрез механизъм на повърхностна дифузия [1,2]

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -B \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}, \quad \frac{\partial u(0, t)}{\partial x} = m, \quad m > 0, \quad \frac{\partial^3 u(0, t)}{\partial x^3} = 0, \\ 0 < x < \infty, \quad t > 0 \quad (4)$$

Линейният модел (4) беше решен наскоро чрез нова техника на интегралния баланс наречена **Многократен Интегрален Метод** (Multiple-integral-balance Method, **MIM**) [7] (Глава 1.6) и в случай на субдифузия (модел предложен в [8]) с дробна по време производна [9] (Глава 4.5). И при двете решения се наблюдава силно субдифузионно поведение, защото повърхността на браздата се развива във времето по закона $t^{1/4}$.

Сега тази глава представя приближено решение на пълния модел (1) чрез метода на интегралния баланс [10,11,12,13,14,15,16].

1.2. Мотивация за това изследване

Основната идея за това изследване идва от елегантната работа на Broadbridge [2], където моделът (1) е решен точно (виж коментарите по-

* Публикувано като : [Hristov J., On the integral-balance solvability of the nonlinear Mullins model of groove evolution, *Applied Mathematics and Computing*, ICMC 2018, Varanasi, India, Springer Proceedings in Mathematics & Statistics, in press](#)

нататък в текста), а също така се дефинира един по-общ клас от модели от типа на Mullins (a more general class of nonlinear Mullins-type models). По-точно, след натрупания опит с прилагане на метода на интегралния баланс към нелинейни дифузионни модели [15,16,17], както и след решенията на линеаризирания модел (4) [7] и неговата дробно-диференциална версия [9] чрез МІМ, следващото предизвикателство е решението на (1), един опит, който не е правен до сега. Резултатите са представени в следващия текст.

2. МЕТОД НА ИНТЕГРАЛНИЯ БАЛАНС: необходима информация

Интегралният метод, приложен към дифузионни модел на пренос на топлина или маса, използва постановката за крайна дълбочина на проникване на дифузанта $\delta(t)$, която еволюира във времето, и рязък фронт на решението [10,11] движещ се крайна скорост. Съществуват две основни техники на интегриране на този метод: метод с просто (единично) интегриране познат като метод на интегралния топлинен баланс (**НВІМ**) на Goodman [10,11,12,13,14,15] и метод с двойно интегриране (Double-Integration method, **ДІМ**) [13,15,16,17,18,19,20]. Основните правила на тези техники на интегриране са представени в следващите точки.

2.2. Метод с двойно интегриране

Методът използващ двойно интегриране, в класическата си постановка е познат като *подобрен метод интегрален метод* (**РІМ**) [13,15,16,17]. Той използва процедура с две последователни интегрирания: първо интегриране

от 0 до x и второ интегриране от 0 до δ (виж детайли в цитираната литература и предхождащите глави на Част 1). Тук обаче, ние ще използваме една нова (модифицирана) форма на метода (5a) [16,18,19]), развита от автора (ДІМ) (виж предхождащите глави и Глава 2.1 също), където след прилагане на правилото на Leibniz се получава (5b)

$$\frac{d}{dt} \int_0^{\delta} \left(\int_x^{\delta} \theta(x,t) dx \right) dx = a_0 \theta(0,t) \quad (5a,b)$$

В (5a) първото интегриране е в близост до фронта (от x до δ). Методът представен чрез (5a) е общ по своята идея и позволява прилагането му както към модели от цял порядък [14] така и към модели използващи дробни по време производни [16,18,19,20] (виж детайли [13,15,16] и съответните глави на тази работа).

3. РЕШЕНИЕ ЧРЕЗ МЕТОДА НА ИНТЕГРАЛНИЯ БАЛАНС

Преди прилагането ДІМ към (1) е необходима предварителна трансформация на уравнението в една по-удобна форма като стандартно нелинейно дифузионно уравнение. По-точно с помощта на трансформацията на Broadbridge (BT) на нелинейната част на (1) [2] е възможно прилагането на метода на интегралния баланс.

3.1. Трансформация на основното уравнение

Следвайки Broadbridge [2] и с помощта на граничното условие (2) (виж също първото гранично условие (3), ние можем да приложим смяна на променливите $\Theta = u_x/m$. В резултат на това получаваме

$$u = \int_{-\infty}^x \Theta(z, t) dz \quad (6)$$

и

$$\frac{du}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^x \Theta(z, t) dz \quad (7)$$

Прилагайки правилото на Leibniz в обратен порядък (на този използван в предишната точка) и граничното условие съответстващо на полу-безкрайна среда, ние можем да трансформираме (1) във вида [2]

$$\int_{-\infty}^x \frac{\partial \Theta}{\partial t} dx = D(\Theta) \frac{\partial \Theta}{\partial x}, \quad (8)$$

След диференциране по отношение на пространствената координата x получаваме модел в една по-позната форма

$$\Theta(0, t) = \frac{u_x(0, t)}{m} = 1, \quad \Theta(\infty, t) = 0 \quad (9)$$

Следователно, ние получихме задача на Dirichlet по отношение на променливата $\Theta(x, t)$.

По-нататък, Broadbridge [2] получава точно автомоделно решение чрез предварително въвеждане (ansatz) на класическата безизмерна променлива $\eta_B = (1/2)(x/\sqrt{D_0 t}) = (\eta/2)$ (η се дефинира по естествен път в процеса на решението представено в тази глава). В този момент ние спираме анализа на решението на Broadbridge, но ще се обръщаме към него, когато специфични моменти на решенгето развивано тук позволяват сравнение. Сега, ние тръгваме по един различен път на решение чрез метода на интегралния баланс приложен към трансформирания модел (8).

3.2. Апроксимиращ профил

Преди прилагането на DIM е необходимо да се избере функцията на апроксимиращия профил $\Theta_a(x/\delta)$. В това решение е използван обобщен параболичен профил с недефинирана експонента

$$\Theta_a = \Theta_s (1 - x/\delta)^n, \quad \Theta_s = \Theta(0, t) = 1 \quad (10)$$

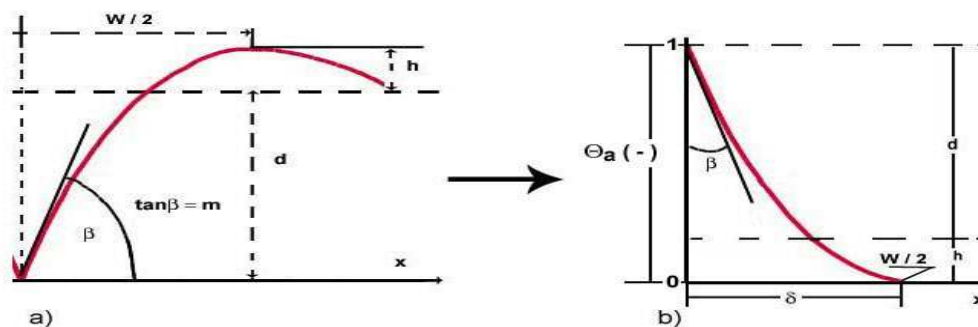
Профилът (10) изпълнява всички гранични условия, на двата края на дифузионния слой ($0 \leq x \leq \delta$), за всяка стойност на експонентата n [7,11,12,13,15,16,19,20]. Това негово качество позволява гъвкавост при оптимизиране на числената стойност на експонентата n , както ще бъде показано по-нататък в тази глава. С граничните условия (3) за изходната задача и трансформацията (6) имаме

$$\Theta(\delta) = \Theta_x(\delta) = \Theta_{xx}(0, t) = \Theta_{xxx}(0, t) = 0$$

Съгласно схематичното представяне на Фиг.1a, дълбочината на проникване $\delta(t)$ е равна на половината от отвора на каверната (браздата), т.е. $\delta(t) = w(t)/2$, от основата $x=0$ до инфлексната точка (защото след тази точка започва повърхността на следващата бразда). Схемата на Фиг.1b е обърнат профил, съответстващ на дифузионна задача на Dirichlet..

3.3. Нелинейният коефициент $D(\Theta)$

В трансформирания нелинеен модел (8) функционалната връзка между дифузионния коефициент и променливата Θ се преобразува като



Фиг.1. Схематично представяне на половината от профила на браздата (а) и инвертиран профил (b) наподобяващ класическа дифузионна задача в термини на трансформираната променлива $\Theta(x, t)$, който обяснява защо се използва интегралния подход [6]. Схемата е като тази в глава 1.6 и глава 4.5 . Показана е тук за пълнота на изложението

$$D(u_x) = \frac{D(0)}{1+(u_x)^2} \Rightarrow D(\Theta) = \frac{D(0)}{1+a\Theta^2},$$

$$a = m^2 \quad (11)$$

Това е нелинейност от тип Fujita [21,22,23], както специално се коментира от Broadbridge [2]. Тази нелинейна форма на $D(\Theta)$ налага трансформиране на дифузионния член преди прилагането на интегралния метод

Използвайки означението $D(0) = D_0$, за краткост в изразите, ние можем да приставим дифузионния член в дясната страна на (8) като

$$D(\Theta) \frac{\partial \Theta}{\partial x} D(\Theta) = \frac{D_0}{(1+a\Theta^2)} \frac{\partial \Theta}{\partial x} =$$

$$= D_0 \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\arctan(a\Theta)}{\sqrt{a}} \right] \quad (12a)$$

След тази стъпка, моделът (11) се представя като

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = D_0 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\frac{\arctan(a\Theta)}{\sqrt{a}} \right] \quad (12b)$$

3.4. Дълбочина на проникване (отвор на каверната)

Следвайки правилата на DIM, имаме следното интегрално съотношение

$$\frac{d}{dt} \int_0^\delta \left(\int_x^\delta \Theta dx \right) dx = \int_0^\delta \int_x^\delta D_0 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\frac{\arctan(a\Theta)}{\sqrt{a}} \right] dx dx$$

$$(13)$$

Двойното интегриране в (13), отчитайки граничните условия, води до

$$\frac{1}{(n+1)(n+2)} \frac{d\delta^2}{dt} = D_0 \frac{\arctan(a)}{\sqrt{a}} = D_0 M(m) \quad (14)$$

$$M(m) = \frac{\arctan(a)}{\sqrt{a}} = \frac{\arctan(m^2)}{m} = \text{const.} \quad (15)$$

Началното условие $\Theta(x, 0) = 0$, което съответствува на физически обоснованото условие $\delta(t=0) = 0$, води до следния резултат за дълбочината на проникване

$$\delta = \sqrt{D_0 t} \sqrt{M(m)(n+1)(n+2)} = \sqrt{D_0 t} \sqrt{M(m)N},$$

$$N = \sqrt{(n+1)(n+2)} \quad (16)$$

Следователно, дълбочината на проникне се развива във времето съгласно класическата дифузионна зависимост (закон на Фик) $\sqrt{t}$, което е в съгласие с резултата на Broadbridge [2]. За разлика от (21), решението на линеаризирания модел (4) ясно демонстрира субдифузионен характер $\delta \equiv t^{1/4}$ [7,9] (виж също [8], Глава 1.6 и Глава 4.5 по-нататък). Освен това, ние можем да представим дълбочината на проникване чрез ефективен дифузионен коефициент $D_m = D_0 M(m)$ и като следствие да получим форма, която наподобява решението на линейната задача (постоянен дифузионен коефициент) [10,11,12], а именно $\delta_m = \sqrt{D_m t} \sqrt{(n+1)(n+2)}$. Независимо от това, обаче, при този подход се губи явния ефект от нелинейността.

3.5. Приближено решение (профил на браздата)

С получената функционална връзка за $\delta(t)$ приближеното решение на модела (8) е

$$\Theta_a = \left(1 - \frac{x}{\sqrt{D_0 t} \sqrt{M(m)} \sqrt{N}} \right)^n = \left(1 - \frac{\eta}{\sqrt{M(m)} \sqrt{N}} \right)^n$$

$$\eta = \frac{x}{\sqrt{D_0 t}} \quad (17)$$

като по този начин естествено се дефинира Болцмановата променлива $\eta = x / \sqrt{D_0 t}$.

Сега нека се спомним началната смяна на променливите $\partial u / \partial x = \Theta / m \Rightarrow \partial u_a / \partial x = \Theta_a / m$ и от тук получаваме

$$\frac{du_a}{dx} = \frac{1}{m} \left(1 - \frac{x}{\sqrt{D_0 t} \sqrt{M(m)} \sqrt{N}} \right)^n \quad (18)$$

Интегриране в (18) от 0 до δ води до

$$u_a(x, t) = \int_0^\delta \Theta_a dx = - \frac{\sqrt{D_0 t} \sqrt{M(m)} \sqrt{N}}{m(n+1)} \left(1 - \frac{x}{\delta} \right)^{n+1} \Big|_0^\delta \quad (19)$$

Следователно, в термини на оригиналната променлива $u(x, t)$, по-точно решението за $u_a(x, t)$ е

$$u_a(x, t) = \frac{\sqrt{D_0 t} \sqrt{M(m)}}{m} \sqrt{\frac{(n+2)}{(n+1)}} \left(1 - \frac{x}{\sqrt{D_0 t} \sqrt{M(m)}} \right)^{n+1} \quad (20)$$

За $x = 0$ в (25) получаваме

$$u_a(0, t) = \frac{\sqrt{D_0 t} \sqrt{M(m)}}{m} \sqrt{\frac{(n+2)}{(n+1)}}, \quad \text{което е}$$

максималната дълбочина на браздата (виж също по-нататък в текста). В този случай, нормализираният профил, следващ от (20), приема вида

$$\bar{U}_a = \frac{u_a(x, t)}{u_a(0, t)} = \frac{u_a(x, t)}{\sqrt{D_0 t}} \frac{m}{\sqrt{M(m)}} \sqrt{\frac{(n+1)}{(n+2)}} = \left(1 - \frac{\eta}{\sqrt{M(m)} \sqrt{N}} \right)^{n+1} \quad (21)$$

Алтернативно, ние можем да мащабираме дълбочината на браздата с естествения мащаб за дължина $\sqrt{D_0 t}$, като по този начин правим приближеният профил безизмерен, а именно

$$U_a = \frac{u_a(x, t)}{\sqrt{D_0 t}} = \frac{\sqrt{M(m)}}{m} \sqrt{\frac{(n+2)}{(n+1)}} \left(1 - \frac{\eta}{\sqrt{M(m)}\sqrt{N}} \right)^{n+1} \quad (22)$$

В този момент нека се припомним, че приближеното решение на линеаризирания модел (4), получено чрез МІМ [7,9] (Глава 1.6 и Глава 4.5 по-нататък) е

$$u_a(x, t)_{MIM} = \frac{m}{n} (Bt)^{1/4} M_4^{1/4} \left(1 - \frac{x}{(Bt)^{1/4} M_4^{1/4}} \right)^n = \frac{m}{n} (Bt)^{1/4} M_4^{1/4} \left(1 - \frac{\eta_M}{M_4^{1/4}} \right)^n \quad (23)$$

В израза (23) $M_4 = \Gamma(n+k+1)/\Gamma(n+k)$, а k е броят на интегриранията съгласно правилата на МІМ (в случая на модела (4) имаме $k=4$). Автомоделната променлива $\eta_M = x/(Bt)^{1/4}$ е не-Болцманова и естественият мащаб за дължина е $(Bt)^{1/4}$ [1,7,9]. В този смисъл, важно е да се отбележи, че $\eta_M = x/(Bt)^{1/4}$ е използвана от Mullins [1] като анзац (ansatz), позволяващ трансформиране на уравнение (4) в обикновено диференциално уравнение. Следователно, линейната задача (4) е лесно разрешима чрез МІМ, но решението зависи от нелинейната променлива $\eta_M = x/(Bt)^{1/4}$. В същото време нелинейната задача (1) има решение представено чрез Болцмановата променлива $\eta = x/\sqrt{D_0 t}$, но изисква предварителна нелинейна трансформация (трансформация на Broadbridge).

В допълнение, условието $x=0$ дефинира максималната стойност на $u(x, t)$ достигана в дъното на браздата, отбелязана като дълбочина на браздата $G_0(t)$, а именно

$$G_0(t) = u_0(0, t) = \frac{\sqrt{D_0 t} \sqrt{M(m)}}{m} \sqrt{\frac{n+2}{n+1}}, \quad \bar{G}_0(t) = \frac{u_0(0, t)}{\sqrt{D_0 t}} = \frac{\sqrt{M(m)}}{m} \sqrt{\frac{n+2}{n+1}} \quad (24)$$

където $\bar{G}_0(t)$ е нормализираната дълбочина на браздата (с естествения мащаб за дължина $\sqrt{D_0 t}$).

4. Оптимизирате на приближеното решение

4.1. Функция на грешката от апроксимация (Residual function)

Когато в моделното уравнение се използва приближеното решение (вместо точното), тогава напълно естествено е остатъчната функция на грешката на модела (1)

$$R_u = \left[\frac{\partial u_a}{\partial t} - D_0 \frac{1}{1 + (\partial u_a / \partial x)^2} \frac{\partial^2 u_a}{\partial x^2} \right] \neq 0 \quad (25)$$

Функцията на остатъчната грешка може да представи в алтернативни форми, следвайки (12a) и (12b), а също така (25 и 26)

$$R_{\Theta 1} = \left[\frac{\partial \Theta_a}{\partial t} - D_0 \frac{1}{1 + a \Theta_a^2} \frac{\partial \Theta_a}{\partial x} \right] \neq 0 \quad (26)$$

$$R_{\Theta 2} = \left\{ \frac{\partial \Theta_a}{\partial t} - D_0 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\frac{\arctan(a \Theta_a)}{\sqrt{a}} \right] \right\} \neq 0 \quad (27)$$

4.2. Апроксимация на дифузионния член

В този момент, проблемът, който трябва да бъде разрешен, е адекватната апроксимация на втория член на $R_{\Theta 2}$ като функция на x/δ . Добре

известно е, че $\arctan(y)$ има сходящо се представяне чрез степен ред

$$\arctan(y) \approx \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \frac{y^{2j+1}}{2j+1} \approx y - \frac{y^3}{3} + \frac{y^5}{5} - \frac{y^7}{7} + \dots \quad (28)$$

с радиус на сходимост 1, когато $-1 \leq y \leq 1$.

В разглеждания от нас случай имаме $0 \leq \Theta_a \leq 1$ при $0 < a < 1$. Тогава с $y = a\Theta_a$ е възможно да се получи развитие в ред апроксимиращ $\arctan(a\Theta_a)$. Тази идея, обаче, създава нов проблем свързан броя на членовете от (34), които трябва за се вземат, за да се получи коректна апроксимация. Въпреки това, като първи опит в това направление, ние ще използваме линейната апроксимация на $\arctan(y)$ като

$\arctan(y) \approx \frac{\pi}{4} y$ за $-1 \leq y \leq 1$, по-точно, когато $y \rightarrow 1$. Тази апроксимация наподобява първия член от реда (28) и съответствува на условието $x/\delta \rightarrow 0$, когато $y = a\Theta_a$ (това физически означава апроксимация на профила на каверната в близост до нейното начало $x = 0$, за $m = 1$). Тъй като ние имаме винаги $(1 - x/\delta) < 1$ и $m < 1 \Rightarrow a = m^2 \ll 1$, то тогава поне произведението $a\Theta_a = a(1 - x/\delta)$ е от порядъка на 10^{-2} : при тези изходни данни, ясно се вижда от реда (28), че след третия или четвъртия член, всички останали могат да бъдат пренебрегнати. Следователно, замествайки $y = a\Theta_a$ ние получаваме $\arctan(a\Theta_a) \approx \frac{\pi}{4}(a\Theta_a)$. Тогава, с профила (10), тази линейна апроксимация води до

$$\arctan(a\Theta_a) \approx \frac{\pi}{4}(a\Theta_a) \approx \frac{\pi}{4} a \left(1 - \frac{x}{\delta}\right)^n \quad (29)$$

Апроксимацията (29) е валидна за всяко $n > 0$, защото от условието $0 \leq y \leq 1$ следва винаги да се изпълнява условието $(1 - x/\delta)^n < 1$.

Следователно, дифузионният член се апроксимира като

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\frac{1}{\sqrt{a}} \arctan \left(a \left(1 - \frac{x}{\delta}\right)^n \right) \right] \approx \frac{\pi}{4} \sqrt{a} \left[\frac{n(n-1)}{\delta^2} \left(1 - \frac{x}{\delta}\right)^{n-2} \right] \quad (30)$$

4.3. Оптимални експоненти при линейна апроксимация на $\arctan(a\Theta_a)$

Оптималната стойност на експонентата n може да се определи чрез минимизация на средноквадратичната грешка

$$E(n, m) = \int_0^1 \left(R_{\Theta_{a2}} \right)^2 dz = \frac{1}{t^2} e(n, m) \quad (31)$$

, където $e(n, m)$ е резултатът от интегрирането на независещия от времето член в (31). Тази процедура е добре описана в [12,15,16,19,20] (виж предхождащите глави на **Част 1**) и ние ще избегнем тук големите изрази.

Минимизацията на $e(n, m)$ при зададени стойности на m беше извършена с помощта на Maple (локална минимизация при ограничение $n > 2$). За две стойности на m използвани в литературата: $m = 0.1$ [1] и $m = 0.4$ [2] оптималните експоненти са: $n(m = 0.1) \approx 0.985$ с $e(n, m) \approx 0.0289$, и $n(m = 0.4) \approx 0.932$ с $e(n, m) \approx 0.00511$, съответно. Тези стойности на

експонентата не изпълняват условието $n > 2$. Независимо от този резултат, проведените числени експерименти показваха, че с намаляване на стойността на m (т.е. при моделиране на много тесни бразди с малки ъгли β в основата им - виж Фиг.1)) стойностите на оптималните експоненти нарастват и *обратно*. Като примери поддържащи това твърдение можем представим следните числени резултати: $n(m = 0.01) \approx 2.257$ with $e(n, m) \approx 0.0696$, $n(m = 0.02) \approx 1.86$ с $e(n, m) \approx 0.0585$ и $n(m = 0.3) \approx 0.933$ с $e(n, m) \approx 0.00967$.

Следователно, първият опит за използване на апроксимацията (35) доведе до резонни резултати за малки стойности на m , което, до известна степен, ограничава приложението на тази апроксимация. Въпреки тази начална оценка, ако използваме повече членове от реда (34) получаваме следната апроксимация

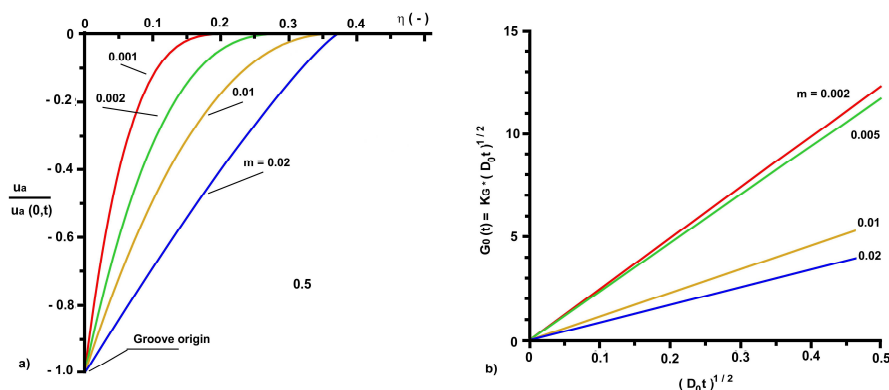
4.4.Кратки коментарии

За да направим рекапитулация на резултатите от решението, трябва да кажем, че това са първите опити за прилагане на интегрален метод към пълното уравнение на Mullins, поточно с използване на техниката с двойно интегриране. Основните моменти от решението са нелинейната трансформация на дифузионния

член, началната трансформация на Broadbridge (BT) и накрая апроксимацията на дифузионния член в остатъчната функция. Ново предизвикателство е процедурата за апроксимация и оптимизация на експонентата на приетия профил при апроксимацията на $\arctan(a\Theta)$, където Θ е обобщен параболичен профил (13). Тези проблеми, обаче са извън рамките на това изследване.

5. ЧИСЛЕНИ СИМУЛАЦИИ И КОМЕНТАРИИ

Числени симулации с приближеното решение Θ_a (22), всъщност с нормализирания профил (26) са показани на Фиг.2а. Всички тези профили съответствуват на DIM решения с оптимални експоненти, изпълняващи условието $n > 2$ или поне $n \approx 2.0$. Получените профили показват физическата адекватност на решението, защото по-големите изходни ъгли (представени чрез стойността на m) водят до по-големи отвори на профила на браздата и *обратно*. В този момент на изследването, получените резултати са до известна степен качествени, тъй като не съществува голяма база от данни в литературата относно стойностите на m . Въпреки това, безизмерното представяне на Фиг.2 е с обобщаващ характер, защото като независима променлива е използвана Болцмановата променлива $\eta = x/\sqrt{D_0 t}$.



Фиг.2. Числени симулации на DIM: а) Безизмерни профили на бразди за различни стойности на m и функция на Болцмановата променлива $\eta = x/\sqrt{D_0 t}$; б) Дълбочина на браздата като функция на естествения мащаб за дължина $\sqrt{D_0 t}$

Еволюцията на дълбочината на браздата, представена на Фиг.2b, възпроизвежда директно линейната връзка с естествения мащаб за дължина $\sqrt{D_0 t}$. За големи стойности на m се получават по-широки каверни, но при по-бавно нарастване на профила и *обратно*.

Както дълбочината на браздата така и отвора на каверната (представено като $w = 2\delta$) са резултат на Гаусов дифузионен процес, защото $G_0^2 \equiv t$ и $w^2 \equiv t$ (защото $\delta^2 \equiv t$); за разлика на линеаризирания модел (4), където $\delta^2 \equiv t^{1/2}$ и процесът е субдифузионен. За по-голяма яснота, с приближеният профил (103), средноквадратичното преместване характеризиращо дифузионния процес е $\langle x^2 \rangle \equiv \delta^2$ (виж [20] или Глава2.4). Когато $\langle x^2 \rangle \equiv t^\gamma$ с $\gamma=1$, ние имаме нормален Гаусов процес, но при $\gamma < 1$ процесът е субдифузионен (see \ [9,20]. В контекста на

описание на физическия процес това поведение трябва да се свързва с процеса на формиране на браздата: механизмът на изпарение-кондензация (модел (1) е Гаусов, докато повърхностната дифузия е субдифузионен процес [1,9,20].

ИЗВОДИ

Представено е приближено решение, чрез метод на интегралния баланс, на нелинейния модел на Mullins за термично набраздяване. Използването на техниката с двойно интегриране (DIM) е успешно, но решението изисква бъдат направени две важни предварителни стъпки:

- 1) Трансформация на Broadbridge конвертираща оригиналния модел (1) в задача на Dirichlet за нелинейно дифузионно уравнение с нелинейност на Fujita;
- 2) Нелинейна трансформация на дифузионния член. Това е техника, която е използвана по-рано [15,19] (Глава 1.2 и Глава 2.1), позволяваща използването на обобщения параболичен профил

(13). Основен момент в процеса на оптимизация на приближеното решение е апроксимацията на нелинейния дифузионен член.

Числените експерименти показват адекватно поведение на симулираните резултати моделиращи профилите на термично образувани бразди.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Mullins, W.W. Theory of thermal grooving, *J. Appl. Phys.*, 28 91957) ,3, pp.333-339.
- [2] P. Broadbridge, Exact solvability of the Mullins nonlinear diffusion model of groove development, *J. Math. Phys.*, 30 (1989), 7,pp.1648-1651.
- [3] P. Broadbridge, Exact solution of a degenerate fully nonlinear diffusion equation, *Z.angw.Math.Phys.*, 55 92004), pp.534-538. doi:10.1007/s00033-004-3015-1
- [4] Kitada, A. On properties of a classical solution of nonlinear mass transport equation $u_t = u_{xx}/(1 + u_x^2)$, *J. Math. Phys.*, 27 (1986), 7,pp.1391-1392.
- [5] Robertson, W.M., Grain-boundary growing by surface diffusion for finite slopes, *J. Appl. Phys.*, 42 (1971), 1, pp.463-467.
- [6] Martin, P.A., Thermal grooving by surface diffusion: Mullins revisited and extended to multiple grooves, *Q. J. Appl. Math.*, 67 (2009), 1, 1 pp. 125-136.
- [7] Hristov, J., Multiple integral-balance method: Basic idea and an example with Mullin's model of thermal grooving, *Thermal Science*, 21 (2017), pp.1555-1560.
- [8] M. Abu Hamed, A.A. Nepomnyashchy, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 298–299 (2015),1,pp. 42-47
- [9] Hristov J., Fourth-order fractional diffusion model of thermal grooving: Integral approach to approximate closed form solution of the Mullins model, *Math. Model. nature. Phenomena*, 12 (2017),6, pp.xxx-xxx , in press.
- [10] Goodman, T.R, The heat balance integral and its application to problems involving a change of phase, *Transactions of ASME*, 80 (1958), 1-2, pp.335-342.
- [11] Hristov J (2009) The heat-balance integral method by a parabolic profile with unspecified exponent: Analysis and Benchmark Exercises. *Thermal Science* 13(2009) , 2, pp.27-48
- [12] Myers, J.G. Optimizing the exponent in the heat balance and refined integral methods. *Int Comm Heat -Mass Transfer*, 36 (2009), 2, pp. 143-147.
- [13] Mitchell, S. L., Myers, T. G. Application of standard and refined heat balance integral methods to one-dimensional Stefan problems. *SIAM Review* 52 (2010) ,1, pp. 57–86.
- [14] Sahu, S.K., Das, P.K., Bhattacharyya, S., A comprehensive analysis of conduction-controlled rewetting by the Heat balance Integral Method, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 49 , (2006), 25-26, pp.4978-4986.
- [15] Hristov J., Integral solutions to transient nonlinear heat (mass) diffusion with a power-law diffusivity: a semi-infinite medium with fixed boundary conditions, *Heat Mass Transfer*, 52 (3) (2016) , 1, pp.635-655
- [16] Hristov J., Double Integral-Balance Method to the Fractional Subdiffusion Equation: Approximate solutions, optimization problems to be resolved and numerical simulations, *J. Vibration and Control*, 23 (2017),7,pp. 2795-2818.
- [17] Volkov, V. N., Li-Orlov, V. K., A Refinement of the Integral Method in Solving the Heat Conduction Equation, *Heat Transfer Sov. Res.*, 2 (1970), 2, pp. 41-47.
- [18] Hristov J., Approximate solutions to time-fractional models by integral balance approach, Chapter 5, In: *Fractional Dynamics* , C. Cattani, H.M. Srivastava, Xia-Jun Yang, (eds), De Gruyter Open, 2015 , pp.78-109.
- [19] Hristov J., Integral-balance solution to nonlinear subdiffusion equation, Chapter 3, in *Frontiers in Fractional Calculus*, 2017 , S. Bhalekar, Ed. Bentham, 2017, pp.57-88.
- [20] Hristov J., Subdiffusion model with time-dependent diffusion coefficient: Integral-balance solution and analysis, *Thermal Science*, 21 (2017),1A, pp.69-80
- [21] Fujita H. (1952) The Exact Pattern of a Concentration-Dependent Diffusion in a Semi-infinite Medium. Part II. *Textile Research Journal* 22: 823-827.
- [22] Fujita H. (1952) The exact pattern of a concentration-dependent diffusion in a semi-infinite medium. Part 1. *Textile Research Journal* 22: 757-760.
- [23] Fujita H (1954) The Exact Pattern of a Concentration-Dependent Diffusion in a Semi-infinite Medium. Part III. *Textile Research Journal*, 24:234-240.

Глава 1.8

НЕЛИНЕЙНА ТРАНСФОРМАЦИЯ НА ДИФУЗИОННИЯ ЧЛЕН И АПРОКСИМАЦИЯ НА ПРИБЛИЖЕНИЯ ПРОФИЛ

Тази глава разглежда някои основни детайли на техниките на решение, при използване на метода на интегралния баланс, когато дифузионния коефициент е зависим от концентрацията (температурата). По-точно, представя се свойството на приближения профил да запазва своята вътрешна структура, когато се прилага нелинейна трансформация, като повдигане на степен. Освен това, разглежда се апроксимацията на приближения параболичен профил с недефинирана експонента чрез сходящ се степен ред с алтерниращи коефициенти, като възможност позволяваща апроксимация на дробни (по време и пространство) производни от него.

1.ВЪВЕДЕНИЕ

Сега, след демонстриране на приближените решения на няколко дифузионни модела с нелинейни дифузионни коефициенти е необходимо да се представи основният подход (основните правила) при трансформиране на дифузионните членове на моделите, а също така и някои специфични характеристики на апроксимиращия профил с недефинирана експонента.

2.ТРАНСФОРМАЦИЯ НА НЕЛИНЕЙНИЯ ДИФУЗИОНЕН ЧЛЕН

2.1. Основна идея

Нека разгледаме нелинейно дифузионно уравнение с коефициент зависещ от концентрацията $D(u)$, представено в обща форма като

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_0 f(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right] \quad (1)$$

Тук $f(u)$ е функционалната зависимост между дифузионния коефициент и концентрацията (температура), където D_0 е стойността на $D(u)$ за $u = 0$ или за някоя референтна температура (концентрация). Произведението $D_0 f(u)$ трябва да се редуцира до D_0 , най-често за $u = 0$.

Основната трансформация на нелинейния дифузионен член може да се представи като

$$W(u(x,t)) = \int \left[f(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right] dx + C_1,$$

$$f(u) \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} W(u(x,t)) \quad (2a,b)$$

Тогава дифузионното уравнение (1) може да се представи във вида

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left[D_0 \frac{\partial W(x,t)}{\partial x} \right] \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{\partial u}{\partial t} &= D_0 \frac{\partial^2 W(x,t)}{\partial x^2} \end{aligned} \quad (3a,b)$$

Ако функцията $u(x,t)$ се замени с приближения профил $u(x/\delta)$, тогава условията на границите на дифузионния слой трябва да се изпълняват едновременно от $u(\delta)$

$$u(\delta) = 0 \Rightarrow W(\delta) = \text{const.} \Rightarrow \partial W(\delta)/\partial x = 0 \quad (4)$$

$$u(0,t) = u_s \Rightarrow W(0,t) = W(u_s) \quad (5)$$

2.2. Интегрален подход към трансформираното уравнение

2.2.1. Метод с единично интегриране

Прилагайки интегриращата техника на НВІМ към (3b) получаваме

$$\begin{aligned} \int_0^{\delta} \frac{\partial u}{\partial t} dx &= \int_0^{\delta} D_0 \frac{\partial^2 W(x,t)}{\partial x^2} dx \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{d}{dt} \int_0^{\delta} u dx &= D_0 \left[\frac{\partial W(x,t)}{\partial x} \right]_0^{\delta} \end{aligned} \quad (6a,b)$$

или

$$\frac{d}{dt} \int_0^{\delta} u dx = -D_0 W(0,t) \quad (7)$$

2.2.2. Метод с двойно интегриране

С техниката на DIM, приложена към (3b) имаме

- Първа стъпка (интегриране)

$$\begin{aligned} \int_x^{\delta} \frac{\partial u}{\partial t} dx &= \int_x^{\delta} D_0 \frac{\partial^2 W(x,t)}{\partial x^2} dx \Rightarrow \\ \Rightarrow \int_x^{\delta} \frac{\partial u}{\partial t} dx &= D_0 \left[\frac{\partial W(x,t)}{\partial x} \right]_x^{\delta} \end{aligned} \quad (8a,b)$$

$$\int_x^{\delta} \frac{\partial u}{\partial t} dx = -D_0 \frac{\partial W(x,t)}{\partial x} \quad (9)$$

- Втора стъпка (интегриране)

$$\begin{aligned} \int_0^{\delta} \int_x^{\delta} \frac{\partial u}{\partial t} dx dx &= \int_0^{\delta} -D_0 \frac{\partial W(x,t)}{\partial x} dx \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{d}{dt} \int_0^{\delta} \int_x^{\delta} u(x,t) dx dx &= \\ = -D_0 [W(\delta,t) - W(0,t)] \end{aligned} \quad (10a,b)$$

$$\frac{d}{dt} \int_0^{\delta} \int_x^{\delta} u(x,t) dx dx = D_0 W(0,t) \quad (11)$$

Следователно, с двете техники за интегриране, десните страни на интегралните съотношения зависят от $W(0,t)$.

С основния апроксимиращ профил $\bar{u}_a = u_a/u_s = (1-x/\delta)^n$, който може да се представи също като $\bar{u}_a = (1-z)^n$, $0 < z = x/\delta < 1$,

ние можем чрез примери да демонстрираме как трансформацията на дифузионния член работи при различните задачи. Преди демонстрациите трябва да се отбележи едно основно свойство на използвания параболичен профил с недефинирана експонента. По-точно, когато имаме степен от апроксимиращата функция $(u_a)^p$, то тогава $(\bar{u}_a)^p = (u_a/u_s)^p = (1-x/\delta)^{np}$. Следователно, структурата на профила остава непроменена, докато степенния показател (експонентата) се променя от n на np .

3. ПРИМЕРИ

3.1. Степенна функционална зависимост

Нека разгледаме степенната зависимост, съответстваща на модела с бавна дифузия

$$D_0 f(u) = D_0 u^m, \quad m > 0 \quad (12)$$

вече използвани в Глава 1.1 и Глава 1.2

В този случай нелинейната трансформация (2) води до

$$\begin{aligned} W_{PL} &= D_0 \frac{u^{m+1}}{m+1} + C_1 \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{\partial^2 W_{PL}}{\partial x^2} &= \frac{D_0}{m+1} \frac{\partial^2 u^{m+1}}{\partial x^2} \end{aligned} \quad (13a,b)$$

С техниката на НВИМ и използвайки (13b) се получава следното интегрално съотношение

$$\frac{d}{dt} \int_0^{\delta} u dx = -\frac{D_0}{m+1} u^{m+1}(0,t) \quad (14)$$

С техниката на DIM, крайното интегралното съотношение е

$$\frac{d}{dt} \int_0^{\delta} \int_x^{\delta} u(x,t) dx dx = D_0 \frac{u^{m+1}(0,t)}{m+1} \quad (15)$$

3.3. Линеен зависимост

С линейната зависимост (използвана в Глава 1.3) имаме

$$D_0 f(u) = D_0 (1 + \beta u) \quad (16)$$

След това, нелинейната трансформация (2) води до

$$W_L = D_0 \left[1 + \beta \frac{\partial}{\partial x} \frac{u^2(x,t)}{2} \right] + C_1 \quad (17)$$

Прилагайки **НВМ** получаваме следното интегрално съотношение

$$\frac{d}{dt} \int_0^\delta u dx = \int_0^\delta \left[D_0 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x,t) + D_0 \frac{\beta}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u^2(x,t) \right] \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \int_0^\delta u dx = -D_0 \left[\frac{\partial}{\partial x} u(0,t) + \frac{\beta}{2} \frac{\partial}{\partial x} u^2(0,t) \right] \quad (18a,b)$$

С техниката на **DIM** интегралното съотношение е

$$\frac{d}{dt} \int_0^\delta \int_x u(x,t) dx dx = D_0 \left[u(0,t) + \frac{\beta}{2} u^2(0,t) \right] \quad (19)$$

3.4. Линеен-потенциална зависимост

Това е по-общата зависимост, която се редуцира до линейната зависимост (16) за $m=1$ (виж Глава 1.4)

$$D_0 f(u) = D_0 (1 + \beta u^m) \quad (20)$$

В този случай нелинейната трансформация води до

$$W_{LP} = D_0 \left[1 + \beta \frac{\partial}{\partial x} \frac{u^{m+1}(x,t)}{m+1} \right] + C_1 \quad (21)$$

С използване на **НВМ** се получава следното интегрално съотношение

$$\frac{d}{dt} \int_0^\delta u dx = -D_0 \left[\frac{\partial}{\partial x} u(0,t) + \frac{\beta}{m+1} \frac{\partial}{\partial x} u^{m+1}(0,t) \right] \quad (22)$$

С техниката на **DIM** крайното интегрално съотношение е

$$\frac{d}{dt} \int_0^\delta \int_x u(x,t) dx dx = D_0 \left[u(0,t) + \frac{\beta}{m+1} u^m(0,t) \right] \quad (23)$$

3.6. Обратен подход към степенната зависимост

Този случай е директно свързан с нелинейното дифузионно уравнение представено във вида

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_0 \frac{\partial^2 u^k}{\partial x^2} \quad (24)$$

Решението на (24) е демонстрирано в Глава 4.4 .

Независимо от основната идея, позволяваща лесно да се направи замяната на u^k с $\bar{u}^k = (1-z)^{kn}$, ние можем да покажем, че (24) да се представи във вида

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_0 \frac{\partial}{\partial x} \left(k u^{k-1} \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad (25)$$

За $k > 1$, ние може да разглеждаме (25) като дегенериращо дифузионно уравнение със степенна зависимост на дифузионния коефициент, вече разгледана по-горе.

3.5. Дифузионни коефициенти с нелинейности на Fujita

Тук ние разглеждаме някои основни трансформации на нелинейностите на [1,2,3]. Тази нелинейност съответства на моделите с бърза дифузия, където функционалната зависимост в най-обща форма се представя като

$$F_m = \frac{D_0}{(a \pm b u^p)^m} \quad (26)$$

3.5.1. Нелинейност F1

Когато разглеждаме процес на адсорбция, контролирана от дифузията в микрочастиците (микропорите) [4,5,6], то тогава нелинейността е с $p = 1$, а именно

$$F_1 = \frac{D_0}{(a-bu)^m}, m = 1 \quad (27)$$

Това е нелинейност **F1** на Fujita

За $m = 1$ дифузионното уравнение приема формата

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_0}{(a-bu)} \frac{\partial u}{\partial x} \right] \quad (28)$$

Сега, прилагайки трансформацията (2), дифузионният член в дясната страна на (28) може да се представи като

$$\begin{aligned} \frac{D_0}{(a-bu)} \frac{\partial u}{\partial x} &= -\frac{1}{b} \frac{\partial}{\partial x} [\ln(a-bu)] \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_0}{(a-bu)} \frac{\partial u}{\partial x} \right] &= \\ &= -\frac{D_0}{b} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [\ln(a-bu)] \end{aligned} \quad (29a,b)$$

3.5.2. Нелинейност F2

Ако материалът където се извършва дифузията набъбва или имаме адсорбция контролирана от дифузията в макропорите с изотерма на Langmuir [4,6], то тогава нелинейността е

$$F_2 = \frac{D_0}{(a-bu)^2}, p = 1, m = 2 \quad (30)$$

С цел яснота на прилаганите към уравнението трансформации ние ще направим демонстрация за случая, когато $m = 2$. Най-

известната версия на дифузионното уравнение с нелинейност на Fujita [6] е

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_0}{(a-bu)^2} \frac{\partial u}{\partial x} \right] \quad (31)$$

Дифузионният член в дясната страна на (31) може да представи като

$$\frac{1}{(a-bu)^2} \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{b} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{(a-bu)} \right] \quad (32)$$

Следователно, новата форма на (31) е

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{D_0}{b} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\frac{1}{(a-bu)} \right] \quad (33)$$

В общия случай, аналогът на (32) е

$$\frac{1}{(a-bu)^m} \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{b} \frac{1}{(m+1)} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{(a-bu)^{m+1}} \right] \quad (34)$$

За случаите на адсорбция [4,5,6] имаме $a = 1$ и $0 \leq b \leq 1$.

3.5.3. Редукция до позната форма на уравнение за бърза дифузия

Нека сменим променливата като $\theta = a - bu$. Тогава, $(a - \theta)/b = u$, $\partial u / \partial t = (-1/b) \partial \theta / \partial t$ и $\partial u / \partial x = (-1/b) \partial \theta / \partial x$. С новата променлива и нелинейността (28) дифузионното уравнение приема вида

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_0 \theta^{-m} \frac{\partial \theta}{\partial x} \right] \quad (35)$$

Резултатът (35) е параболично уравнение моделиращо бърза дифузия, за разлика от случая с $m > 0$ (бавна дифузия) (Глава 1.1 и Глава 1.2), където решението се развива с ясно дефиниран фронт (Глава 1.2). Случаят с $m < 0$ има решение с всички свойства на линейното дифузионно уравнение, а по-точно: безкрайна скорост на разпространение на потока. Следвайки идеята на нелинейната трансформация на дифузионния член имаме

$$\theta^{-m} \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{1}{1-m} \frac{\partial \theta^{1-m}}{\partial x},$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{1-m} \frac{\partial \theta^{1-m}}{\partial x} \right] = \frac{1}{1-m} \frac{\partial^2 \theta^{1-m}}{\partial x^2} \quad (36)$$

Тук, за $u = 0$, съответстваща на фронта за $x = \delta$, имаме $\theta(\delta) = a$. Аналогично, за граничното условие при $x = 0$ имаме $u(0) = 1$ и следователно $\theta(0) = a - b$. Последната форма на (36) налага условието $1 > m$.

3.5.4. Нелинейност F3

Този тип нелинейност на Fujita възниква в нелинейното уравнение на Mullins (37)-(38) моделиращо процеса на термично набраздяване [7], разгледано в глава Глава 1.6, Глава 1.7 и Глава 4.5.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \left[\frac{D_0}{1 + (\partial u / \partial x)^2} \right] \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (37)$$

$$\frac{\partial u(0, t)}{\partial x} = u_0 = \text{const.}, \quad \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \rightarrow 0 \text{ as } x \rightarrow \infty,$$

$$u(x, 0) = 0 \quad (38)$$

Въвеждайки крайна дълбочина δ на дифузионния процес при описание на развитието на термичната бразда, възникват следните гранични условия: $u_x(0) = m$ и $u_x(\delta) = u_{xx}(\delta) = u_{xxx}(\delta) = 0$.

Следвайки Broadbridge [8] уравнение (37) може да се представи в общ вид като

$$\frac{\partial y}{\partial t} = \left[\frac{D_0}{(1 + ay^2)} \right] \frac{\partial y}{\partial x}, \quad y = \partial u / \partial x \quad (39)$$

В случая (37) имаме $a = 1$.

С формулировката (39), трансформацията (2) на дифузионния член води до

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{D_0}{1 + au^2} \frac{\partial y}{\partial x} \right) &= \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\arctan(ay(x))}{\sqrt{a}} \right) = \\ &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\frac{\arctan(ay)}{\sqrt{a}} \right] \end{aligned} \quad (40)$$

Тази трансформация е използвана в Глава 1.7 при решението на нелинейното уравнение на Mullins.

При прилагане на метода с двойно интегриране резултатът е

$$\begin{aligned} \int_0^\delta \int_x^\delta D_0 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\frac{\arctan(ay(x))}{\sqrt{a}} \right] dx dx &= \\ &= D_0 \frac{\arctan(a)}{\sqrt{a}} \end{aligned} \quad (41)$$

при гранични условия $y(0) = 1$ и $y(\delta = \partial u(\delta) / \partial x) = 0$

4. ПРИБЛИЖЕН ПРОФИЛ: апроксимация чрез сходящ ред

Решенията на проблемите разгледани в тази работа и получени основно чрез метода на интегралния баланс, независимо от метода на интегриране, се апроксимират чрез параболичен профил с недефинирана експонента

$$\bar{u} = \frac{u_a}{u_s} = \left(1 - \frac{x}{\delta} \right)^n = (1 - z)^n, \quad 0 < z = x/\delta < 1 \quad (42)$$

Производни от цял порядък по отношение на x и t от (42) се получават лесно чрез правилата за диференциране на сложна функция. За разлика от тези случаи, обаче, при използване на дробни (по време и пространство) производни, познатата дефиниция за диференциране на сложна функция е неприложима (виж специално дискусията в Глава 3.1). За да се избегне възникващия проблем се използва апроксимиране на (42) чрез

сходящ алтерниращ степенен ред (подход предложен в Глава 3.1). Въпросите свързани с тази апроксимация и сходимостта на реда са разгледани в следващите точки.

4.1. Развитие като ред

Проблемът за апроксимация чрез степен ред възниква при апроксимация на дробни (по време и пространство) производни от апроксимиращия профил (42). По-точно, разглежда се проблема за апроксимация чрез ограничен брой членове от сходящ се алтерниращ ред (виж всички глави в Част 2).

Едно привлекателно свойство на профила (42) е че той може да се апроксимира чрез сходящ се ред, по отношение на степени на z , а именно

$$(1-z)^n \approx \sum_{k=0}^K (-1)^k b_k z^k, \quad b_k = (-1)^k \frac{1}{k!} (n-k)! \quad (43a)$$

Като пример, за $K=6$, имаме

$$\begin{aligned} (1-z)^n &\approx \sum_{k=0}^{K=6} (-1)^k b_k z^k = \\ &= 1 - nz + \frac{1}{2} n(n-1) z^2 - \frac{1}{6} n(n-1)(n-2) z^3 + \\ &+ \frac{1}{24} n(n-1)(n-2)(n-3) z^4 - \\ &- \frac{1}{120} n(n-1)(n-2)(n-3)(n-4) z^5 + O(z^6) \end{aligned} \quad (43b)$$

Същото общо представяме е в сила и когато експонентата n се замени с произведението np , по-точно $\bar{u}^p = \left[(1-z)^n \right]^p = (1-z)^{np}$, ситуация възникваща при нелинейната трансформация на дифузионния член.

Всъщност $(1 \pm z)^n$ е елементарна функция разложима в степен ред [9]

$$(1 \pm z)^n = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} (\mp 1)^k \frac{(-n)_k}{k!} z^k, \quad n > 0, \quad |z| < 1 \quad (43c)$$

Кое то еквивалентно на това представено чрез (43a) и (43b).

Именно възможността да се представи приближеното решение (профил) като елементарна функция $(1-z)^n$, където $|z| = |x/\delta| < 1$, прави приложените решения, получени чрез HBIM и DIM, решения в затворена форма (closed-form solutions).

Тестовите за сходимост са разгледани в следващата точка.

4.2. Тестове за сходимост

Първо, нека приложим класическия тест за отношението на два последователни члена (Ratio test), а след това теста за алтерниращи редове (Alternating test)

- Тест за отношението на два последователни члена

В този случай

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow \infty} \left(\frac{b_{k+1}}{b_k} \right) &= \frac{k!}{(k+1)!} \frac{n(n-k-1)}{n(n-k)} = \\ &= \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n-(k+1)}{k+1} = \lim_{k \rightarrow \infty} \left(\frac{n}{k+1} - 1 \right) = -1 \end{aligned} \quad (44)$$

Следователно, този тест показва, че апроксимиращият степенен ред е условно сходящ се. Независимо от това, трябва да обърнем внимание на факта, че редът (43a) е алтерниращ с монотонно намаляващи коефициенти b_k . Освен това, условието $b_k > b_{k+1}$ се изпълнява за всички

естествени числа k . Тогава, по-адекватният подход е теста за алтерниращи редове.

• **Alternating test** (Метод на Leibniz.)

1) Този тест изисква, като първо условие, $\lim_{k \rightarrow 0} b_k = 0$

От дефиницията на реда (43) имаме

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow \infty} b_k &= \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n(n-k-1)}{k!} = \\ &= \lim_{k \rightarrow \infty} \left(\frac{n^2}{k!} - \frac{n}{(k-1)!} - \frac{1}{k!} \right) = 0 \end{aligned} \quad (45)$$

2) Второто условие на теста е свързано с условието $b_{k+1} \leq b_k$

От дефиницията (43) имаме

$$\begin{aligned} b_{k+1} \leq b_k &\Leftrightarrow \frac{[n-(k+1)]!}{(k+1)!} \leq \frac{(n-k)!}{k!} \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow \frac{[n-(k+1)]}{(k+1)} \leq \frac{(n-k)}{1} \end{aligned} \quad (46)$$

С условие $n > k$ и $k > 1$, второто условие на теста се изпълнява за всяко k . Следователно редът (43) е сходящ.

Обикновено, а по-точно за случая на дробни по време производни, при приближеното решение на субдифузионно уравнения (виж Част 2) от порядък μ , имаме $n \equiv 1/\mu$, $0 < \mu < 1$ и $n \rightarrow 2$ за $\mu \rightarrow 1$. Следователно, условие 2) се изпълнява за достатъчно на брой членове от апроксимиращия ред (43). Както ще бъде показано в Глава 2.1., като пример, само 3 члена (т.е. $K=2$) са достатъчни за определяне на оптималната експонента на профила.

4.3. Следствие

Сега, ние трябва отбележим едно важно следствие от възможността приближеният профил да се апроксимира чрез сходящ се степен ред. Както ще бъде показано в следващите глави (виж Част 2), където се използват дробни (по време и пространство) производни, се получават следните степенни зависимости (scaling relationships) представени в обща форма като: $z \equiv t^{-\lambda}$ or $z \equiv x^{\lambda}$. Тогава, замествайки тези степенни зависимости в реда (43), ние получаваме степенни редове по отношение на x и t , което позволява да се приложат правилата на дробното диференциране, и по този начин се апроксимират дробни производни от апроксимиращия параболичен профил.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Fujita H. (1952) The Exact Pattern of a Concentration-Dependent Diffusion in a Semi-infinite Medium. Part II. Textile Research Journal 22: 823-827.
- [2] Fujita H. (1952) The exact pattern of a concentration-dependent diffusion in a semi-infinite medium. Part 1. Textile Research Journal 22: 757-760.
- [3] Fujita H (1954) The Exact Pattern of a Concentration-Dependent Diffusion in a Semi-infinite Medium. Part III. Textile Research Journal, 24:234-240.
- [4] Ruthven DM (2000) The rectangular isotherm model for adsorption kinetics. Adsorption 6: 287-291.
- [5] Ruthven DM (2004) Sorption kinetics for diffusion-controlled systems with strongly concentration-dependent diffusivity. Chem. Eng. Sci. 59: 4531-4545.
- [6] Ruthven DM, Principles of adsorption and adsorption processes. Chapter 6, Wiley, New York, 1984.,
- [7] Mullins, W.W. Theory of thermal grooving, J. Appl. Phys, 28 (1957), 3, pp.333-339.
- [8] P. Broadbridge, Exact solvability of the Mullins nonlinear diffusion model of groove development, J. Math. Phys, 30 (1989), 7, pp.1648-1651.

- [9 Козлов В.П. Двумерные осесимметричные
 нестационарные задачи теплопроводности,
 Минск, Наука и техника, 1986 (приложение
 2,стр.379- Таблица 2)]

ЧАСТ 1

НЕЛИНЕЙНИ ДИФУЗИОННИ МОДЕЛИ С ПРОИЗВОДНИ ОТ ЦЯЛ ПОРЯДЪК

ОСНОВНИ РЕЗУЛТАТИ И ПРИНОСИ

Основните резултати на изследванията представени в част 1 са свързани с интегрални решения на дифузионни модели (нестационарна топлопроводност) с нелинейни дифузионни коефициенти. Показано е как за този тип дифузионни уравнения могат да бъдат получени приближени аналитични решения, в затворена форма, чрез директно прилагане на интегралния метод, без предварителна линеаризация на изходното уравнение.

1. ОСНОВНИ РЕЗУЛТАТИ

Глава 1.1: Това е първият опит за решение на дегенериращо дифузионно уравнение на нестационарна топлопроводност със степенен закон на изменение на коефициента на топлинна дифузия. Решението, чрез метода с просто интегриране, използва смяна на променливите и трансформация на изходния модел в уравнение на топлинна вълна.

Глава 1.2: Това е първият опит за решение на дегенериращо дифузионно уравнение на нестационарна топлопроводност, със степенен закон на изменение на коефициента на топлинна дифузия, чрез директно прилагане на интегрален метод. Основна стъпка на решението е трансформацията нелинейния дифузионен член на моделното уравнение, което прави възможно използването на метода с двойно интегриране в неговата класическа форма (използвана от Волков и Mitchell and Myers), познат като **Refined integral method (RIM)**.

Глава 1.3 Интегралния метод е използван за решаване на задача на нестационарна топлопроводност с линейно-зависещ от температурата коефициент на топлинна дифузия. Използвана е същата технология за трансформиране на дифузионния член, както в Глава 1.2. За разлика от Глава 1.2, тук е използвана нова модификация на метода с двойно интегриране, позволяваща прилагането на интегралния метод независимо от порядъка на дробната по време производна (локална или нелокална, виж Глава 2.2). Дискутиран е проблема с предварителното мащабиране на дифузионния коефициент и за този случай е получено интегрално решение чрез смяна на променливите. Получените аналитични решения са сравнени с числени такива и са тествани с параметри на реални материали.

Глава 1.4 е продължение на глава 1.3, при което функционалната зависимост на дифузионния коефициент (топлинна дифузия) от температурата е потенциално-степенна.

Глава 1.5 предлага един алтернативен подход за решение на нестационарна топлопроводност чрез използване на второ уравнение от дробен порядък $1/2$. Този подход позволява да се избегне основния недостатък на метода с просто интегриране, а именно градиента на границата да се изчислява чрез апроксимиращия профил.

Глава 1.6 представя иновативен подход, чрез нова техника на интегралния метод наречена **метод с многократно интегриране**, който е приложим за дифузионни уравнения от висок ред (висок порядък на

производната на дифузионния член). Методът е демонстриран с решение на модела на Mullins за термично набраздяване на повърхности чрез механизъм на повърхностна дифузия. **Това, на практика, е първото развитие, стъпка напред, на интегралния метод към дифузионни уравнения от по-висок ред.**

Глава 1.7 представя интегрално решение на нелинейното уравнение на Mullins за термично набраздяване на повърхности чрез механизъм на изпарение-кондензация. Показана е възможност за прилагане на метода с двойно интегриране, след предварителна трансформация на Broadbridge. Това е първият известен, за сега, опит за интегрално решение на този модел.

2. ОСНОВНИ ПРИНОСИ

1. Получени са приближени интегрални решения на нестационарна топлопроводност със степенен закон на изменение на дифузионния коефициент (дегенериращо дифузионно уравнение) (**Глава 1.1** и **Глава 1.2**)
2. Получени са приближени интегрални решения на нестационарна топлопроводност с линейна (**Глава 1.3**) и потенциално-степенна (**Глава 1.4**) зависимост на топлинния дифузионен коефициент от температурата чрез подобрена версия на интегралния метод наречена метод с двойно интегриране (Double Integration Method, **DIM**), която се различава от подобрения метод на Волков и Mitchell-Myers (известен като Refined Integral Method, RIM) и даваща възможност да се работи както с локални така и с нелокални производни по време.
3. Предложен е иновативен подход, наречен **метод с многократно интегриране (MIM)**, който е приложим за дифузионни уравнения от висок ред (висок порядък на производната на дифузионния член) (**Глава 1.6**). Показано е, че метода на просто интегриране и метода с двойно интегриране (**DIM**) са частни случаи на метода с многократно интегриране.
4. Получено е приближено интегрално решение на нелинейното уравнение на Mullins за термично набраздяване на повърхности чрез механизъм на изпарение-кондензация (**Глава 1.7**).

Част 2

ДИФУЗИОННИ МОДЕЛИ СЪС СИНГУЛЯРНА ИЗЧЕЗВАЩА ПАМЕТ

Кратко представяне

ЧАСТ 2**АНОМАЛНИ И НЕЛИНЕЙНИ ДИФУЗИОННИ МОДЕЛИ С ПРОИЗВОДНИ
ОТ ДРОБЕН ПОРЯДЪК СЪС СИНГУЛЯРНА ПАМЕТ****ПРЕДГОВОР**

Тази част представя резултати върху приближени интегрални решения на дифузионни модели със сингулярна (степенна) памет. Основната цел на тези изследвания е да се покаже как може да се прилага метода на интегралния баланс при наличие в модела на дробни производни, както по време, така и по пространство.

Разгледани са проблеми на субдифузионни уравнения с нелинейни дифузионни коефициенти (с концентрационно-зависим и изменящ се с времето коефициент на дифузия).

Представени са интегрални решения на супердифузионни модели с постоянен, степенен и потенциално степен дифузионен коефициент, зависещ от пространствената координата.

Направен е нов извод на известното уравнение на Ward-Tordai за адсорбция на сърфактанти, изцяло с апарата на дробното диференциално смятане.

ЧАСТ 2 е организирана по следния начин:

1. Глава 2.1 показва как може да прилага метода на интегралния баланс за решаване на дифузионни уравнения съдържащи интегрални с памет, по-точно с функции на влияние представени чрез слаби сингулярни ядра.

2. Глава 2.2 е пълно изследване върху приближеното решение на линейното субдифузионно уравнение чрез метода на двойно интегриране. Разгледани са подробно възникващите проблеми при определяне на оптималната експонента на приближеното решение и методите за тяхното разрешаване.

3. Глава 2.3 представя приближено решение на нелинейно субдифузионно уравнение с коефициент на дифузия зависещ степенно от концентрацията. Разгледания проблем е дробно-диференциален аналог на този от глава 1.2.

4. **Глава 2.4** разглежда приближено решение на субдифузионен модел с дифузионен коефициент зависещ от времето по степенен (фрактален) закон

5. **Глава 2.5** представя приближено решение на супердифузионно уравнение с постоянен дифузионен коефициент и дробна по пространство производна на Riemann-Liouville.

6. **Глава 2.6** представя приближено решение на супердифузионно уравнение със степенен коефициент на дифузия (зависещ от пространствената координата) чрез метода на просто интегриране и дробна по пространство производна на Riemann-Liouville.

7. **Глава 1.7** представя приближено решение на супердифузионно уравнение със потенциално-степенен коефициент на дифузия (зависещ от пространствената координата) чрез метода на просто интегриране и дробна по пространство производна на Riemann-Liouville.

7. **Глава 1.7** Представя нов извод на известното уравнение на Ward-Tordai за адсорбция на сърфактанти, изцяло с апарата на дробното диференциално смятане. Изследвана е задачата на Коши с изотерми на Хенри и Фрьондлих.

ГЛАВА 2.1

ДИФУЗИОННИ МОДЕЛИ СЪС СЛАБИ
СИНГУЛЯРНИ ЯДРА В ИЗЧЕЗВАЩАТА
ПАМЕТ*Как може да се използва метода на интегрален
баланс?

Тази глава представя основната идея за прилагане на интегралния метод към дифузионни модели с изчезваща памет моделирана чрез слаби сингулярни ядра. Показано е как три техники за интегриране (метод на интегрален топлинен баланс, метод с двойно интегриране и метод на замръзнал фронт) работят с обобщен параболичен профил с недефинирана експонента за получаване на приближени аналитични решения (closed-form solutions). Основните етапи са демонстрирани с решения на модели, където изчезващата памет е представена чрез интеграл на Volterra или дробна по време производна на Riemann-Liouville.

1. ВЪВЕДЕНИЕ

Тази глава (и носещата публикация) представя резултати относно използването на метода на интегрален баланс към дифузионни уравнения, където изчезващата памет е представена чрез слаби сингулярни (степенна функция) ядра. Методът е демонстриран чрез решения на примери, където функцията на паметта е представена чрез интеграл на Volterra и дробни по време производни на Riemann-Liouville. Решенията са директни и не изискват сложна техника на изчисления. Разгледани са три версии на интегралния метод водещи до

приближени аналитични решения (closed-form approximate profiles).

1.1. Дифузия с изчезваща памет (diffusion with
a fading memory)

Дифузионните процеси, на топлина и маса, се представят чрез един основен модел на скоростта на преноса (rate law) [1] $\partial u / \partial t = -\partial J / \partial x$.

С допускането, че потока $J(x, t)$ е пропорционален на градиента (1b), т.е.

$$J(x, t) = -D \partial u(x, t) / \partial x \text{ получаваме}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (1)$$

Следователно, дефинирайки коефициента на дифузия D като транспортен коефициент получаваме класическото дифузионно уравнение на Фик (Фурие) (1) с *нефизична безкрайна скорост на разпространение на потока*. За да бъдем по-ясни в изложението, ние фокусираме вниманието върху процеси на дифузия за малки времена, където се наблюдават процеси на релаксация (*problems concerning diffusion in short-times where the relaxation takes place*). За големи времена може да се използва коректно уравнение (1). При дифузия на топлина, релаксиращата функция предложена от Cattaneo [2] е представена чрез интеграл на Volterra. В този случай, потокът J и релаксационната (демпфираща) функция $R(x, t)$ са свързани чрез конститутивното уравнение [3]

$$J(x, t) = - \int_0^{\infty} R(x, t) \nabla u(x, t - \tau) d\tau.$$

* Публикувано като: **Hristov J.**, Diffusion Models with Weakly Singular Kernels in the Fading Memories: How the Integral-Balance Method can be Applied?, *Thermal Science*, 19(3) (2015), pp. 947-957; DOI: [10.2298/TSCI130803151H](https://doi.org/10.2298/TSCI130803151H)

В хомогенна среда, демпфиращата функция зависи от времето, но не зависи от пространствената координата. Изследването представено по-нататък в тази глава разглежда релаксационна функция представена като степенно ядро (a power-law kernel) $R(x, t) = (t - \tau)^{-\mu}$. Използването на това ядро води до уравнение (2a)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a_e \int_0^t \frac{1}{(t - \tau)^\mu} \frac{\partial^2 u(x, \tau)}{\partial x^2} d\tau \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\Gamma(\mu)} \frac{\partial u}{\partial t} = a_e^\mu I_t^\mu \left[\frac{\partial^2 u(x, \tau)}{\partial x^2} \right], \quad 0 < \mu < 1 \quad (2a.b)$$

Дробният порядък е в границите $0 < \mu \leq 1$ [4], а еластичният коефициент на дифузия (the elastic diffusivity) a_e има размерност $(m^2/s^{1-\mu})$. Дясната страна на (2a) може да се представи като дробен интеграл на Riemann-Liouville [5], което позволява да се получи уравнение (2b). Този подход се използва широко за моделиране на нестационарни течения на вискозоеластични течности [6-8], течение на гранулирани среди [9] и топлопроводност с проява на памет [10] и т.н. За решения на дифузионните уравнения с изчезваща памет представена чрез интеграл на Volterra най-често се използват приближени аналитични [11] и числени методи [7,11, 12].

Приближените решения представени в тази глава използват метода на интегрален баланс принадлежащ към фамилията на метода с претеглени остатъци (the weighted residuals methods) [13] в две основни версии: 1) Метода на интегрален топлинен баланс (The Heat-Balance

Integral Method, HBIM) и 2) Метод са двойно интегриране (Double-integration method, DIM). В допълнение, е представен и полу-емпиричен метод наречен *Метод на замръзалия фронт* (Frozen Front Approach, FFA) [14-17] успешно използван при уравнения, където релаксационната функция е представена чрез дробни по време производни (модели на нестационарни течения на вискозоеластични течности) [18,19]. Резултатите получени чрез FFA са сравнени с тези получени чрез прилагане на HBIM и DIM.

2. МЕТОД НА ИНТЕГРАЛЕН БАЛАНС

Методът на интегралния баланс [20] използва принципа на крайна дълбочина на проникване на дифузанта (топлина или маса) $\delta(t)$, като по този начин се формира рязък фронт за $x = \delta$. Граничните условия на Goodman за $x = \delta$ са [20]: $u(\delta, t) = 0$ и $u_x(\delta, t) = 0$. Разпределението (решението) в рамките на дифузионния слой могат да се апроксимират чрез профил $u_a(x, \delta)$.

3. МЕТОД НА ИНТЕГРАЛЕН БАЛАНС ПРЕДСТАВЕН ЧРЕЗ ПРИМЕРИ

В следващите примери се използва апроксимиращ профил $u_a = b_1 + b_2 (1 - x/b_3)^n$, където $n > 0$ е недефинирана експонента [22]. Прилагайки граничните условия на Гудман, за всяко $n > 0$, се получава приближен профил представен като $u_a = u_0 (1 - x/\delta)^n$. С цел простота

на изложението на примерите ние приемаме $u_0 = 1$ (задача на Дирихле), което е еквивалентно на използване на безизмерен профил $\tilde{u}_a = u_a / u_0 = (1 - x/\delta)^n$.

2.1. Пример 1: Просто уравнение с еластични ефекти (Simple equation with elastic effect only)

Започваме с просто параболично уравнение моделиращо топлопроводност в твърди среди и релаксираща вискозо-еластичност [7]. Изчезващата памет е представена като ядро $(t-s)^{-\mu}$ с фиктивна променлива s и ефективен еластичен коефициент на дифузия (effective elastic diffusivity) a_e (m^2/s^μ). Следователно, задачата на Дирихле, с начални и гранични условия, може да се формулира като

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a_e \int_0^t \frac{1}{(t-\tau)^\mu} \frac{\partial^2 u(x, \tau)}{\partial x^2} d\tau, \quad 0 < \mu < 1 \quad (3)$$

$$u(x, 0) = 0, \quad 0 \leq x \leq \infty; \quad u(x, t) = 0, \quad x \rightarrow \infty \text{ и}$$

$$u(0, t) = u_0 \quad (4a, c, d)$$

Тъй като задачата (3-4) е параболична [7], въвеждането на крайна дълбочина на проникване $\delta(t)$ е *ad hoc* корекция на основната неадекватност свързана с безкрайната скорост вътрешно присъща на модела (1). С този основен принцип, граничното уравнение (4a,b,c) се замества с $u(\delta, t) = 0$ и $u_x(\delta, t) = 0$.

2.1.1. Решение чрез HBIM

Прилагайки HBIM към (3), правилото на Лайбниц към лявата страна на интегралното съотношение и замествайки u с u_a получаваме

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_0^\delta u_a(x, \delta) dx &= \int_0^\delta \left[a_e \int_0^t \frac{1}{(t-\tau)^\mu} \frac{\partial^2 u_a(x, \tau)}{\partial x^2} d\tau \right] dx \Rightarrow \\ &\Rightarrow \frac{d}{dt} \left(\frac{\delta}{n+1} \right) = a_e \int_0^t \frac{1}{(t-\tau)^\mu} \left(\frac{n}{\delta} \right) d\tau \end{aligned} \quad (5a, b)$$

Интегрирането на (5b) отново от 0 до δ води до

$$\begin{aligned} \frac{1}{2(n+1)} \frac{d}{dt} \delta^2 &= a_e n \int_0^t \frac{1}{(t-\tau)^\mu} d\tau \Rightarrow \\ &\Rightarrow \frac{d}{dt} \delta^2 = a_e 2n(n+1) \frac{t^{1-\mu}}{1-\mu} \end{aligned} \quad (6a, b)$$

Интегрирането на (6b) с начално условие

$\delta(t=0) = 0$ води до следния резултат

$$\delta = \sqrt{a_e} \sqrt{t^{2-\mu}} \sqrt{\frac{2n(n+1)}{(1-\mu)(2-\mu)}} \quad (7a, b)$$

2.1.2. Решение чрез DIM

Първото интегриране на уравнение (3) от 0 до x води до

$$\int_0^x \frac{du}{dt} dx = \int_0^x \left[a_e \int_0^t \frac{1}{(t-\tau)^\mu} \frac{\partial^2 u(x, \tau)}{\partial x^2} d\tau \right] dx \quad (8)$$

Интегралът от 0 до δ , обаче, може да се представи като

$$\int_0^\delta f(\bullet) dx = \int_0^x f(\bullet) dx + \int_x^\delta f(\bullet) dx$$

Следователно, уравнение (5) може да се запише във вида

$$\begin{aligned} \int_0^x \frac{\partial u}{\partial t} dx + \int_x^\delta \frac{\partial u}{\partial t} dx &= \int_0^x \left[a_e \int_0^t \frac{1}{(t-\tau)^\mu} \frac{\partial^2 u(x, \tau)}{\partial x^2} d\tau \right] dx + \\ &+ \int_x^\delta \left[a_e \int_0^t \frac{1}{(t-\tau)^\mu} \frac{\partial^2 u(x, \tau)}{\partial x^2} d\tau \right] dx \end{aligned} \quad (9)$$

Сега, изваждайки (8) от (9) получаваме

$$\int_x^\delta \frac{du}{dt} dx = \int_x^\delta \left[a_e \int_0^t \frac{1}{(t-\tau)^\mu} \frac{\partial^2 u(x, \tau)}{\partial x^2} d\tau \right] dx \quad (10)$$

Интегрирането на (10) от 0 до δ води до крайното интегрално съотношение на DIM, специфично за разглеждания проблем

$$\int_0^\delta \left(\int_x^\delta \frac{du}{dt} dx \right) dx = \int_0^\delta \left\{ \int_x^\delta \left[a_e \int_0^t \frac{1}{(t-\tau)^\mu} \frac{\partial^2 u(x, \tau)}{\partial x^2} d\tau \right] dx \right\} dx \quad (11)$$

Изразът (11) е модифицираното интегрално съотношение на DIM, по-специално неговата лява страна, която беше спомената в т.1.2.2.

Заместваме u с апроксимиращия профил u_a в (14) и след двойното интегриране стигаме до уравнение относно δ

$$\frac{1}{(n+1)(n+2)} \frac{d}{dt} \delta^2 = a_e \int_0^t \frac{1}{(t-\tau)^\mu} d\tau \quad (12)$$

Тъй като дясната страна на (12) е конволюция от 1 и t^μ , развитието на (12) води до

$$\frac{d\delta^2}{dt} = a_e (n+1)(n+2) \frac{t^{1-\mu}}{1-\mu}, \quad (13a,b)$$

$$\delta^2 = a_e (n+1)(n+2) \frac{t^{2-\mu}}{(2-\mu)(1-\mu)}$$

Накрая, решението, чрез DIM, за дълбочината на проникване е

$$\delta_{DIM} = \sqrt{a_e} \sqrt{t^{2-\mu}} \sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{(1-\mu)(2-\mu)}}, \quad 0 < \mu < 1 \quad (14)$$

2.2. Пример 2: Модел с памет чрез дробна по време производна и вискозно съпротивление

В този пример ние се обръщаме към възможността релаксационните ефекти да бъдат представени чрез дробна по време производна

D_t^μ . Моделирането на нестационарно течение на визкозоеластични флуиди от втори порядък (second-grade viscoelastic fluid), като пример, се моделира с уравнение (15) [12,15,31],

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + p D_t^\mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}. \quad (15)$$

В уравнение (15) дробната производна е от тип на Riemann-Liouville [5]

$$D_t^\mu f(x, t) = \frac{1}{\Gamma(1-\mu)} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{1}{(t-\tau)^\mu} f(x, \tau) d\tau \quad (16)$$

По-нататък, $\nu = \eta/\rho$ е кинематичният вискозитет на флуида $[m^2/s]$; $p = \alpha_1/\rho [m^2]$ често се представя като $p = \nu \lambda_r$, където λ_r е времето за релаксация $[s]$; α_1 е вискозоеластичен параметър наричан първи нормален модул на напрежението (the first normal stress modulus). Операторът D_t^μ има дробна размерност по време (a fractional time dimension) $[\rho y^2/\eta]^\mu$; η е динамичния вискозитет на флуида $[N/m^2 s]$. Сега ние ще покажем решение на първата задача на Стокс (Stokes's first problem), където $u(0, t) = u_0$ с нулеви начални условия $u(x, t) = 0, 0 \leq x \leq \infty$.

2.2.1. Решение с НВІМ

Интегрирането на (15) от 0 до δ води до следното съотношение

$$\frac{d}{dt} \int_0^\delta u dx = -\nu \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{x=0} + \int_0^\delta \left(p D_t^\mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) dx \quad (17)$$

С профила $\tilde{u}_a = u_a/u_0 = (1-x/\delta)^n$ интегрирането в (17) води до уравнение относно δ

$$\frac{d\delta^2}{dt} = \nu 2n(n+1) + 2pn(n+1) \frac{t^{-\mu}}{\Gamma(1-\mu)} \quad (18)$$

От (18), с началното условие $\delta(t=0) = 0$ се получава

$$\delta = \sqrt{\nu t} \sqrt{2n(n+1) \left[1 + \left(\frac{p}{\nu t^\mu} \right) \frac{1}{\Gamma(2-\mu)} \right]} \quad (19a,b)$$

От (19b) за $p = 0$ ние получаваме класическото НВІМ решение за нестационарно вискозно течение (First Stokes' problem) с $\delta_\nu(t) = \sqrt{\nu t} \sqrt{2n(n+1)}$, докато за $\nu = 0$ от (19a) получаваме решението за случай когато има само еластични ефекти.

2.2.2. Решение с DIM

С интегриране на (19) от 0 до x , а след това от 0 до δ получаваме

$$\delta_{DIM} = \sqrt{\nu t} \sqrt{(n+1)(n+2) \left[1 + \left(\frac{p}{\nu t^\mu} \right) \frac{1}{\Gamma(2-\mu)} \right]} \quad (20)$$

2.3. Апроксимиращ профил и анализи

Решението чрез НВІМ на **Пример 2**, води до следните приближени решения

$$u_{a \text{ (elastic)}} = \left(1 - \frac{x}{\sqrt{pt} \sqrt{2n(n+1)} \sqrt{\frac{j_\mu}{t^\mu}}} \right)^n \quad (21a)$$

и

$$u_{a \text{ (viscous and elastic)}} = \left(1 - \frac{x}{\sqrt{\nu t} \sqrt{2n(n+1) \left[1 + \frac{p}{\nu t^\mu} j_\mu \right]}} \right)^n \quad (21b)$$

Тези профили са коректни, защото апроксимиращата функция $\tilde{u}_a = u_a/u_0 = (1 - y/\delta)^n$ изпълнява граничните условия наложени на дифузионния слой с дълбочина δ за всяко $n > 1$. Получените интегрални решения не дават информация за стойността на експонентата n и приближените решения изпълняват меките условия наложени от интегралните съотношения, но не и тези които налага изходното дифузионно уравнение (у-ние.3 или у-ние.15). Следователно, минимизирането на грешката на апроксимация, процедура изискваща апроксимиращия профил да е решение на изходното уравнение (у-ние.5а или у-ние.20), е следващата стъпка, която завършва решението и определя оптималната експонента n . Това изисква налагане на допълнителни ограничения върху приближените решения.

3. ОПТИМАЛНИ ЕКСПОНЕНТИ НА ПРИБЛИЖЕНИТЕ РЕШЕНИЯ

3.1. Оценка на грешката и оптимални експоненти

Търсеното на оптимални експоненти на приближените решения означава намиране на профили, които изпълняват условията наложени от изходното дифузионно уравнение за всяка точка на областта $0 \leq x \leq \delta(t)$. В случая на модел (3) следва, че за всяка точка на областта $0 \leq x \leq \delta(t)$ остатъчната функция на грешката $\varphi_\mu(\mu, n)$ представено чрез у-ние (22), трябва да бъде минимална

$$\varphi_{\mu}(\mu, n) = \frac{\partial u_a}{\partial t} - a_e \int_0^t (t-\tau)^{-\mu} \frac{\partial^2 u_a(x, \tau)}{\partial x^2} \rightarrow \min \quad (22)$$

Следователно, условието е

$$E_{\mu 1}(n, t) = \int_0^{\delta} \varphi_{\mu}(\mu, n) dx \rightarrow \min \quad (23)$$

Оптимизационната процедура, с използване на Maple, дава резултат $n_{opt} = 2.808$.

Функцията на грешката $e_{\mu 1}(\mu, n)$ варира от -7.459×10^{-3} за $\mu = 0.1$ до -3.886×10^{-3} за $\mu = 0.9$.

С използване на $n_{opt} = 2.808$ ние получаваме $E_{\mu 1}(n, t) < 0$ за всички $0 < \mu < 1$, което означава че приближено решение дава по-ниски стойности (underestimates) от точното решение.

От друга страна, с цел избягване на съмнения при интегрирането в (34) ние можем да проведем двойно интегриране от 0 до δ , като по този начин конволюционния интеграл е независим от δ . Резултатът от този подход е

$$\int_0^{\delta} E_{\mu 1}(n, t) dx = a_e \frac{t^{1-\mu}}{1-\mu} [n(n+1)-1] \quad (24)$$

Тук тривиалното положително решение е $n = -1/2 + \sqrt{5}/2 \approx 0.618$. Независимо от това, този подход не дава адекватна стойност на експонентата (защото $0.618 < 1$), която е по-малка от експонентата отговаряща на чисто вискозно течение, като е показано по-долу.

Очевидно е, че простият подход (24) за определяне на оптималната експонента не води до физически адекватни резултати. Следователно, по-коректно е да се минимизира средноквадратичната грешка по дължината на дифузионния слой,

т.е. $E_{\mu 2}(n, t) = \int_0^{\delta} (\varphi_{\mu}(\mu, n))^2 dx \rightarrow \min$, също познат като критерии на Langford използван за НВІМ решения [26]).

С пълния модел (20) и решение чрез FFA беше установено в [19] че експонентата е функция на числото на Дебора $n \approx 1/\sqrt{2De}$, което практически означава *експонента зависи от времето*. Тъй като при отсъствие на еластични ефекти, т.е. за $p = 0$ ние получаваме класическия дифузионен модел, то тогава решението чрез НВІМ има оптимална експоната $n \approx 2.35$ [21]. Оптималната експонента получена за $p = 0$ трябва да се разглежда като *долна граница на експонентите моделиращи еластичните ефекти (the lower limit of exponents modelling the elastic effects only)*. Примерни изчисления с $n = 2$ и $n = 3$ водят до $De \approx 0.125$ и $De \approx 0.055$, съответно. По-нататък, за оптималния Нютонов профил ($p = 0$) с експоната $n \approx 2.35$ получаваме $De \approx 0.100$.

Типичното релаксационно време λ_r за вискозоеластични флуиди е в границите $(1-10) \times 10^{-3} s$ за случай на Нютонов динамичен вискозитет променящ се от 2 до $10 \times 10^{-3} [N/m^2 s]$ [27]. От тук, като пример, ние имаме числа на Дебора в интервала $(2-10) \times 10^{-3}$ и от връзката $n \approx 1/\sqrt{2De}$ се получава, че оптималните експоненти се променят от $n \approx 15.81$ до $n \approx 7.071$, съответно. Следователно, при малки числа на Дебора имаме високи стойности на оптималните експоненти на параболичния

профил за малки времена (с доминиращи еластични ефекти). Примери свързани с първата задача на Стокс за модела (15) са публикувани в [19]. Следващият пример демонстрира как тези апроксимации работят за случаите на $\mu = 1/2$ и наличие само на еластични ефекти.

6. ИЗВОДИ

Тази глава представя една възможност за използване на метода на интегрален баланс за приближено решаване на дифузионни модели с изчезваща памет моделирани чрез слаби сингулярни ядра. Показано е, че методът работи добре с ядра на памет представени чрез интеграли на Volterra и апроксимиращи параболични профили с недефинирана експонента. Успешно са демонстрирани три техники на интегриране чрез примери. Всъщност, това е ново приложение на стара идея, и свързани с нея методи, към нови модели и ние се надяваме че демонстрираната техника на решения ще бъде приложима и при други задачи с изчезваща памет.

ДОПЪЛНИТЕЛНА ИНФОРМАЦИЯ:

По-широко изложение на проблемите свързани с интегрални решения на модели включващи дробни по време производни, с използване на

HBIM, DIM и FFA, е направено в

Hristov J., Approximate solutions to time-fractional models by integral balance approach, **Chapter 5**, In: **Fractional Dynamics**, C. Cattani, H.M. Srivastava, Xia-Jun Yang, (eds), De Gruyter Open, 2015, pp.78-109.

Това е поддържаща публикация на представената дисертация и цитирана в тази глава като лит. [25]

Литература

- [1] Ferreira, J.A., de Oliveira, P., Qualitative analysis of a delayed non-Fickian model, *Applicable Analysis*, 87 (2008), 8, pp. 873–886.
- [2] Cattaneo, C., On the conduction of heat (in Italian), *Atti Sem. Mat. Fis. Universit'a Modena*, 3 (1948), 1, pp. 83–101.
- [3] Curtin, M. E, Pipkin, A.C., A general theory of heat conduction with finite wave speeds, *Archives of Rational Mathematical Analysis*, 31 (1968), 2, pp. 313-332.
- [4] Olmstead, W.E., Davis, S.H., Rosenblat, S., Kath, W.L., Bifurcation with Memory, *SIAM J. Appl. Math.*, 46 (1986), 2, pp. 171-188.
- [5] Oldham, K.B., Spanier, J., *The Fractional calculus*, Academic Press, New York, 1974.
- [12] Hayat, T., Asghar, S., Siddiqui, A.M., Some unsteady unidirectional flows of a non-Newtonian fluid, *Int. J. Eng. Sci.*, 38 (2000), 3, pp.337-346
- [6] Agrawal, O. P., Application of Fractional Derivatives in Thermal Analysis of Disk Brakes, *Nonlinear Dynamics*, 38 (2004), 1-4, pp.191–206.
- [7] Dehghan, M., Solution of a partial integro-differential equation arising from viscoelasticity, *Int. J. Computer Math.*, 83 (2006), 1, pp.123–129.
- [8] Siddique, I., Vieru, D., Stokes flows of a Newtonian fluid with fractional derivatives and slip at the wall, *Int. Rev. Chem. Eng.*, 3 (2011), 6, pp.822- 826.
- [9] Pfitzenreiter, T., A physical basis for fractional derivatives in constitutive equations, *ZAMM*, 84 (2004), 4, pp.284-287.
- [10] Miller, R.K., An integro-differential equation for rigid heat conductors with memory, *J. Math. Anal. Appl.*, Vol. 66 (1978), 3, pp. 313-332.
- [11] Yoon, J.M. Xie, S., Hryniv, V., Two numerical algorithms for solving a partial Integro-Differential equation with a weakly singular kernel, *Applications and Applied Mathematics*, 7 (2012), 1, pp.133-141.
- [12] Lopez-Marcos, J. C., A difference scheme for a nonlinear partial integro-differential Equation, *SIAM J. Numer. Anal.*, 27 (1990), 1, pp. 20-31.
- [13] Finlayson, B.A., *The Method of Weighted Residuals and Variational Principles: With Applications in Fluid Mechanics, Heat and Mass Transfer*, Academic Press, 1972, N.Y., ISBN 0122570502, 9780122570506.
- [14] Hristov J., A Short-Distance Integral-Balance Solution to a Strong Subdiffusion Equation: A Weak Power-Law Profile, *International Review of Chemical Engineering-Rapid Communications*, 2 (2010), 5, pp. 555-563
- [15] Hristov J., Heat-Balance Integral to Fractional (Half-Time) Heat Diffusion Sub-Model, *Thermal*

- Science*, 14 (2010), 2, pp. 291-316. doi: 10.2298/TSCI1002291H.
- [16] Hristov J., Starting radial subdiffusion from a central point through a diverging medium (a sphere): Heat-balance integral method, *ThermalScience*, 15 (2011), Supl. 1, S5-S20.
- [17] Hristov J., Approximate Solutions to Fractional Subdiffusion Equations: The heat-balance integral method, *The European Physical Journal-Special Topics*, 193(2011), 1, pp.229-243. DOI:10.1140/epjst/e2011-01394-2
- [18] Hristov, J. Transient Flow of A Generalized Second Grade Fluid Due to a Constant Surface Shear Stress: an approximate Integral-Balance Solution , *Int. Rev. Chem. Eng.*, 3 (2011), 6, pp. 802-809.
- [19] Hristov, J. Integral-Balance Solution to the Stokes' First Problem of a Viscoelastic Generalized Second Grade Fluid, *Thermal Science*, 16 (2012), 2, pp. 395-410.
- [20] Goodman T.R., Application of Integral Methods to Transient Nonlinear Heat Transfer, *Advances in Heat Transfer*, T. F. Irvine and J. P. Hartnett, eds., 1 (1964), Academic Press, San Diego, CA, pp. 51–122.
- [21] Myers, T.G., Optimal exponent heat balance and refined integral methods applied to Stefan problem, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 53 (2010), 5-6, pp. 1119-1127.
- [22] Hristov, J., The heat-balance integral method by a parabolic profile with unspecified exponent: Analysis and benchmark exercises, *Thermal Science*, 13 (2009), 2, pp.22-48.
- [23] Goodwin, J.W., Hughes, R.W., Rheology for chemists: An Introduction, 2nd ed, RSC Publishing, Cambridge, UK., 2008.
- [24] Hristov, J., The frozen front approach (FFA) in integral-balance solutions of diffusion models involving weakly singular kernels in the fading memories: A revisit with analysis and comparative solutions, *Thermal Science*, 13 (2015), to be published
- [25] Hristov, J., Approximate solutions to time-fractional models by integral balance approach, Chapter 5, In: *Fractional Dynamics*, C. Cattani, H.M. Srivastava, Xia-Jun Yang, (eds), De Gruyter Open, 2015, pp.78-109
- [26] Langford D., The heat balance integral method, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 16 (1973), 12, pp. 2424-2428.
- [27] Zilz, J., Schäfer, C., Wagner, C., Poole, R.J., Alves, M.A., Lindner, A., Serpentine channels: micro-rheometers for fluid relaxation times, *Lab Chip*, 14 (2014), 2, pp.351-358. DOI: 10.1039/c3lc50809a

ГЛАВА 2.2

ЛИНЕЕН СУБДИФУЗИОНЕН МОДЕЛ*

Метод с двойно интегриране, приближени
решения и свързани проблеми

Предложено е приближено интегрално решение на линеен субдифузионен модел чрез метод с двойно интегриране. Модел с дробна по време производна и гранични условия на задача на Дирихле (и нулеви начални условия) е тестовият пример демонстриращ метода на решение. Показана е апроксимация на дробните производни (време) на Riemann-Liouville и Caputo, когато апроксимиращия профил е параболичен с недефинирана експонента. Разгледани са проблемите свързани с определяне на оптималната експонента на параболичния профил и апроксимацията на дробната производна по няколко различни начина. Дискутирани са решени и нерешени проблеми при определяне на оптималната експонента. Показани са примери с предварително зададена експонента на профила: квадратични и кубични профили. Направени са сравнителни числени експерименти с точното решение представено чрез функцията на Mainardi в термини на не-Болцманова автомоделна променлива.

1. Въведение

Субдифузионните уравнения описват реални физични процеси като аномална дифузия във фрактали [1], дифузия в дебели мембрани [2], аномална абсорбция на медикаменти [3], силно разклонени порести системи [4,5,6], топлопроводност с топлинни напрежения [7,8], и много други приложения, които са дискутирани в [9,10].

Широко разпространените подходи за решаване на дробно-диференциални модели са

* Публикувано като: Hristov J., Double Integral-Balance Method to the Fractional Subdiffusion Equation: Approximate solutions, optimization problems to be resolved and numerical simulations, *J. Vibration and Control* (SAGE), 23(2017),7,pp. 2795-2818 ;DOI: 10.1177/1077546315622773 ; Impact Factor (2015):1.643

чисто математически по своя характер [11], като: чрез функцията на Mittag-Leffler [12], чрез автомоделни променливи [13], функции на Грийн [14], операторно смятане [15], декомпозиция по Adomian [16], числени методи [17,18], вариационно-итеративен метод [19,20], метод на диференциалните трансформации [21], метод на топлинния интегрален баланс (HBIM) [22,23], В-сплайн оперативни матрици [24]. Всички от тях, всъщност, са приближени методи по своята природа.

Нека разгледаме субдифузия на температура (концентрация) $u(x, t)$ в полубезкрайна среда моделирана от едномерно дробно-диференциално, по време, уравнение

$$\frac{\partial^\mu u(x, t)}{\partial t^\mu} = D_\mu \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \quad 0 < \mu < 1 \quad (1)$$

със следните начални и гранични условия

$$u(0, t) = u_\infty(t), \quad t \geq 0; \quad u(x, 0) = u_\infty = 0, \quad x > 0 \quad (2a, b)$$

Транспортният коефициент D_μ е дробен коефициент на дифузия с размерност $[D_\mu] = [m^2/sec^\mu]$.

В модела (1) дробната по време производна може да бъде както лява производна на Riemann-Liouville от $u(x, t)$, по отношение на времето t [15].

$${}_{RL}D_t^\mu u(x, t) = \frac{1}{\Gamma(1-\mu)} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{u(x, \tau)}{(t-\tau)^\mu} d\tau \quad (3a)$$

така и лява производна на Caputo

$${}_CD_t^\mu u(x, t) = \frac{1}{\Gamma(1-\mu)} \int_0^t \frac{1}{(t-\tau)^\mu} \frac{du(x, \tau)}{d\tau} d\tau \quad (3b)$$

По-нататък в тази глава, когато типа на дробната производна не е определен, ние ще използваме означението $\frac{\partial^\mu u(x,t)}{\partial t^\mu}$.

1.2. Цел на това изследване

Целта на представените изследвания е използване на подобрения интегрален метод с двойно интегриране за получаване на приближено решение на дифузионно уравнение с дробна (по време) производна, **един подход, който не е прилаган до този момент**. Методът е демонстриран чрез решаване на задачата на Дирихле на класическото субдифузионно уравнение с производни на Riemann-Liouville и Caputo и нулеви начални условия. Задачата, с производни на Caputo, има точно решение представено чрез развитие в ред на функцията на Mainardi [35] и развитото тук приближено решение чрез DIM ще може да се тества при сравнение с него.

2. ПРИБЛИЖЕНИ РЕШЕНИЯ (Approximate Double-Integration Solutions)

2.1. Апроксимиращ профил

Апроксимиращият профил u_a е параболичен с недефинирана експонента и изпълняващ граничните условия на Гудман за всяко $n > 0$ [22,34,36,37,38], а именно:

$$u_a = u_s \left(1 - \frac{x}{\delta}\right)^n \quad (4)$$

Профилът (4) е често използван в литературата с $n = 2$ или $n = 3$ [36]. Предимството на (4) е че има свобода за

оптимизиране на точността на апроксимация посредством прилагане на допълнителни ограничения, които не съществуват в концепцията на интегралния метод [36,38]. С цел яснота, позволяваща да се демонстрират възможностите на DIM чрез един класически пример, ние разглеждаме случая с гранично условие $u(0,t) = 1$, което автоматично води до $u_s = 1$; това е еквивалентно на решаване на задачата с безразмерен профил $u_a/u_s = \bar{u} = (1 - x/\delta)^n$. Освен това, ние приемаме нулеви начални условия $u_\infty = u(x,0) = 0$, което позволява да се използват както производни на Riemann-Liouville така и производни на Caputo.

2.2. Апроксимиране на дробният по време двоен баланс интеграл

2.2.1. FT-DBI с дробна по време производна на Riemann-Liouville

Двойното интегриране на временната производна води до

$$\begin{aligned} \int_0^\delta \left[\int_x^\delta {}_{RL}D_t^\mu u_a(x,t) dx \right] dx = \\ = \frac{1}{\Gamma(1-\mu)} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{1}{(\tau-t)^\mu} \frac{\delta^2}{(n+1)(n+2)} d\tau \end{aligned} \quad (5)$$

Следвайки дефиницията на производната на Riemann-Liouville fractional (3a) получаваме

$$\begin{aligned} \int_0^\delta \left[\int_x^\delta {}_{RL}D_t^\mu u_a(x,t) dx \right] dx = \\ = {}_{RL}D_t^\mu [N\delta^2] = N {}_{RL}D_t^\mu \delta^2 \end{aligned} \quad (6)$$

където $N_{RL} = [(n+1)(n+2)]^{-1}$

2.2.2. FT-DBI с дробна по време производна на Caputo

С производна от апроксимацията профил $\frac{du_a(x,t)}{dt} = \frac{x}{\delta^2} n \left(1 - \frac{x}{\delta}\right)^{n-1} \frac{d\delta}{dt}$ получаваме

$$\begin{aligned} \int_0^\delta \int_x^\delta {}_C D_t^\mu u_a(x,t) dx \Big|_x &= \\ &= {}_C D_t^\mu \left[\frac{N}{2} \delta^2 \right] = N {}_C D_t^\mu \delta^2 \end{aligned} \quad (7)$$

където $N = N_{RL} = [(n+1)(n+2)]^{-1}$

2.3. Дълбочина на проникване

От резултатите (6) и (7), получаваме две обикновени дробни диференциални уравнения спрямо дълбочината на проникване

$${}_{RL} D_t^\mu \delta^2 = D_\mu [(n+1)(n+2)] \quad (8)$$

$${}_C D_t^\mu \delta^2 = D_\mu [(n+1)(n+2)] \quad (9)$$

Десните страни на (8) и (9) са константи. Следователно дробното интегриране, с производната на Riemann-Liouville derivative [39] води до

$${}_{RL} \delta^2 = D_\mu (n+1)(n+2) \frac{t^\mu}{\Gamma(1+\mu)} \Rightarrow \quad (10a,b)$$

$$\Rightarrow {}_{RL} \delta(t) = \sqrt{D_\mu t^\mu} \sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{\Gamma(1+\mu)}}$$

За $\mu = 1$, като пример, получаваме зависимостта от цял порядък $\delta_0 = \sqrt{D_0 t} \sqrt{(n+1)(n+2)}$, което е известен резултат на метода с двойно интегриране, познат под друга форма като *Подобрен Интегрален Метод (Refined Integration Method, RIM)* [37,38] (виж главите в Част 1).

С производната на Caputo, прилагайки трансформация на Лаплас [39], получаваме

$${}_C \delta^2 = D_\mu 2(n+1)(n+2) \frac{t^\mu}{\Gamma(1+\mu)} \Rightarrow \quad (11)$$

$$\Rightarrow {}_C \delta(t) = \sqrt{D_\mu t^\mu} \sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{\Gamma(1+\mu)}}$$

Следователно, уравненията за дълбочината на проникване са еднакви, което е един очакван резултат, защото ${}_{RL} D_t^\mu \delta^2 = {}_C D_t^\mu \delta^2$, когато началното условие е $\delta(t=0) = 0$ [39].

2.4. Приблизени решения и свързани проблеми

Следователно, приближено решение е

$$u_a = \left(1 - \frac{x}{\sqrt{D_\mu t^\mu F_n j_\mu}} \right)^n, \quad F_n = \sqrt{(n+1)(n+2)},$$

$$j_\mu = 1/\sqrt{\Gamma(1+\mu)} \quad (12a,bc)$$

Възможни са две алтернативни представяния на приложения профил (решение), а именно:

- Чрез автомобилната променлива $\eta_\mu = x/\sqrt{D_\mu t^\mu}$ (не-Болцманово мащабиране) като

$$u_a = \left(1 - \frac{\eta_\mu}{F_n j_\mu} \right)^n \quad (13)$$

- Чрез ефективна автомобилна променлива $\eta_{eff \mu} = x/\sqrt{D_{eff \mu} t^\mu}$ като

$$u_a = \left(1 - \frac{\eta_{eff \mu}}{F_n} \right)^n, \quad D_{eff \mu} = D_\mu j_\mu = \frac{D_\mu}{\Gamma(1+\mu)} \quad (14a,b)$$

В съгласие с принципа на интегралния метод, приближеното решение е решение на

интегралното съотношение, но не и на изходното моделно уравнение (1). В този контекст, проблемът, които трябва да се разреши може да се формулира като:

- Да се намери оптималната стойност на експонентата n чрез критерий минимизиращ грешката от апроксимация, когато е наложено условието приближения профил (12) да е решение на оригиналното уравнение (1).

3. Грешка на апроксимация и оптимална експонента на профила

3.1. Дефиниция на мярката за грешка от апроксимация

Тъй като имаме приближено решение, то функцията на остатъчната грешка $R(u_a(x, t))$, може да се дефинира като

$$R(u_a(x, t)) = \frac{\partial^\mu u_a}{\partial t^\mu} - D_\mu \frac{\partial^2 u_a}{\partial x^2} \quad (15)$$

Функцията $R(u_a(x, t))$ трябва да бъде равна на нула, ако u_a съвпада с точното решение. В противен случай, тя трябва да достига определен минимум в областта $0 \leq x \leq \delta$, като по този начин се дефинира оптималната стойност на експонентата n (за зададена стойност на дробния порядък μ). По-точно, ние изискваме оценката на грешката да е

$$E_L(n, \mu, t) = \int_0^\delta [R(u_a(x, t))]^2 dx \rightarrow \min, \text{ което е}$$

критерият на Langford, за решения с метода на интегралния баланс [40].

Основният въпрос при определяне на $R(u_a(x, t))$ и $E_L(n, \mu, t)$ е: *Как да се изрази дробната производна $\partial^\mu u_a / \partial t^\mu$ от апроксимиращия параболичен профил (9)?; защото верижното правило за диференциране на сложна функция тук не важи.*

3.2. Поведение на експонентата n на границите на дифузионния слой

С профила (4) и $u_s = 1$, функцията на грешката, с ${}_{RL}D_t^\mu u_a(x, t)$, е

$${}_{RL}R(x, t) = \frac{1}{\Gamma(1-\mu)} \left[\frac{d}{dt} \int_0^t \left[\left(1 - \frac{x}{\delta}\right)^n \right] \frac{1}{(t-\tau)^\mu} d\tau \right] - D_\mu \frac{n(n-1)}{\delta^2} \left(1 - \frac{x}{\delta}\right)^{n-2} \quad (16)$$

С цел да се изпълнят граничните условия на Гудман $u_a(\delta, t) = 0$ и $\partial u_a(\delta, t) / \partial x = 0$, за $x \rightarrow \delta$ (виж уравнение 23) получаваме

$${}_{RL}R(\delta, t) = -\frac{n(n-1)}{\delta^2} \lim_{x \rightarrow \delta} \left(1 - \frac{x}{\delta}\right)^{n-2} \quad (17)$$

От израза (17), следва, че уравнение (1) се изпълнява за $x = \delta$, когато $n > 2$. Това условие следва от основното изискване: решението на (1) трябва да бъде положителна и намаляваща във времето функция, описваща релаксационния процес.

По-нататък, на границата за $x = 0$ с условие $u_a(0, t) = u_s = 1$ имаме

$${}_{RL}R(0, t) = \frac{1}{\Gamma(1-\mu)} t^{-\mu} - \frac{D_\mu n(n-1)}{\delta^2} \quad (18)$$

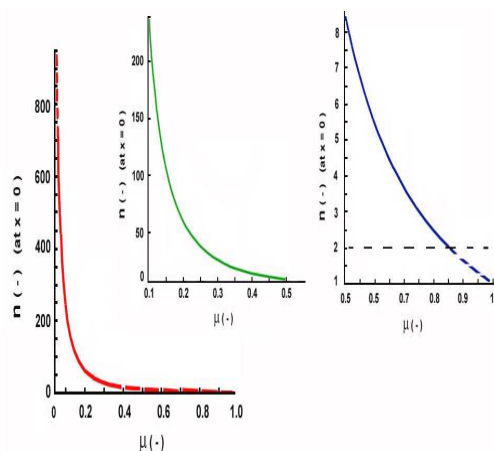
С израза за δ^2 от уравнение (10a) и условието ${}_{RL}R(0,t)=0$ получаваме квадратно уравнение по отношение на n , а именно :

$$\begin{aligned} n^2 [1 - \Gamma(1+\mu)\Gamma(1-\mu)] + \\ + n [3 + \Gamma(1+\mu)\Gamma(1-\mu)] + 2 = 0 \end{aligned} \quad (19)$$

Положителният корен на (19) е

$$n = \frac{1}{2} \left[\frac{3 + \Gamma(1+\mu)\Gamma(1-\mu)}{\Gamma(1+\mu)\Gamma(1-\mu) - 1} - \frac{\sqrt{1 + 14\Gamma(1+\mu)\Gamma(1-\mu) + \Gamma(1+\mu)^2\Gamma(1-\mu)^2}}{\Gamma(1+\mu)\Gamma(1-\mu) - 1} \right] \quad (20)$$

Функцията (20) за $0 < \mu < 1$ е представена на Фиг.1, а някои частни случаи на експонентата n са събрани в Таблица 1.



Фиг. 1. Зависимост на оптималната експонента и дробния порядък на границата $x=0$, определени от ${}_{RL}R(0,t)=0$. Две вложени фигури демонстрират части от кривата .

Таблица 1. Оптимални експоненти определени на границата $x=0$ с Подход 1 и Подход 2

μ	n defined at $x=0$ by ${}_{R_{DIM}}(0,t)=0$	DIM - Approach 1		DIM - Approach 2	
		$n_{opt}(DIM)$	$e_{M(DIM)}(n,\mu)$ minimum	2 terms (N=1)	3 terms (N=2)
0.1	241.870	214.718	$7.05.808 \times 10^{-8}$	3.940	3.806
0.2	59.492	52.841	3.365×10^{-6}	3.765	3.477
0.3	25.719	22.875	3.492×10^{-5}	3.65	3.529
0.4	13.897	12.403	1.79×10^{-4}	3.155*	3.150*
0.5	8.423	7.579	6.262×10^{-4}	2.119*	3.477*
0.6	5.447	4.995	1.712×10^{-3}	1.820	2.596
0.7	3.647	3.504	3.971×10^{-3}	2.060	2.022
0.8	2.468	2.772	8.252×10^{-3}	2.643	2.643
0.9	1.690	2.284	1.580×10^{-2}	2.420	2.310
0.99	1.060	2.14	1.380×10^{-2}	2.013	2.021
(app)-определени с апроксимацията $n(\mu) = \mu^{-A}$;					

Ако се използва производната на Caputo, то функцията на остатъка ${}_C R(x,t)$ е

$${}_C R(x, t) = \frac{1}{\Gamma(1-\mu)} \left[\int_0^t \left[n \left(1 - \frac{x}{\delta} \right)^{n-1} \frac{x}{\delta^2} \frac{d\delta}{dt} \right] \frac{1}{(t-\tau)^\mu} d\tau \right] -$$

$$-D_\mu \frac{n(n-1)}{\delta^2} \left(1 - \frac{x}{\delta} \right)^{n-2} \quad (21)$$

Стойностите на експонентата n определени от условието ${}_{RL} R(0, t) = 0$ показват основната тенденция на развитие на функцията $n = n(\mu)$, т.е. n нараства с намаляване на μ и основното уравнение се изпълнява приближено при главното условие $n > 2$.

3.3. Апроксимация на дробната производна $\partial^\mu u_a / \partial t^\mu$ и оценка на грешката

За да се избегнат проблеми с определяне на дробната производна от u_a ние ще трансформираме областта с подвижни граници $0 \leq x \leq \delta(t)$ в такава с фиксирани граници $0 < \xi < 1$, чрез въвеждане на променливата (координата на Zener) $\xi = x/\delta$ [41]. В пространството с ξ координата, апроксимиращия профил се представя във вида

$$u_a = (1 - x/\delta)^n \Rightarrow V(\xi, t) = (1 - \xi)^n \quad (22)$$

В този контекст, интегралното съотношение на метода с просто интегриране

(НВІМ) е $\int_0^1 R(\xi, t) d\xi$, докато за DIM то е

$$\int_0^1 \int_z^1 R(\xi, t) d\xi dz \quad (z \text{ е формална променлива}).$$

Освен това, в ξ -пространство, процедурата на минимизация минимизацията разглежда

минимума на функцията на средноквадратичната грешка $E_M = \int_0^1 [R(\xi, t)]^2 d\xi$ [38,42].

Следователно, в ξ -пространство имаме

$$\frac{\partial^\mu u_a}{\partial t^\mu} \rightarrow \frac{\partial^\mu V(\xi, t)}{\partial t^\mu} = \frac{\partial^\mu}{\partial t^\mu} (1 - \xi)^n \quad (23)$$

Тъй като $V(\xi, t)$ е сложна функция, то изразът за производна за аналитична функция $\phi(y)$ [43,44] (Abramowitz and Stegun, 1964, chapter 24; Oldham and Spanier, 1974, p. 80) е

$$\frac{d^\mu \phi}{dy^\mu} = \frac{y^{-\mu}}{\Gamma(1-\mu)} \phi +$$

$$+ \sum_{k=1}^{\infty} \binom{\mu}{k} \frac{y^{k-\mu}}{\Gamma(k-\mu+1)} \frac{d^{\mu-k} [1]}{dy^{\mu-k}} \frac{d^k \phi}{dy^k} \quad (24)$$

В израза (24) членът за $k=0$ е отделен от другите за яснота на следващия анализ. **Тъй като верижното правило за диференциране на сложна функция, както с производна на Riemann-Liouville, така и с производна на Caputo не е в сила** тогава ние имаме нов проблем за разрешаване, а именно **апроксимация на дробната по време производна $\partial^\mu V(\xi, t)/\partial t^\mu$ от апроксимиращия профил.**

3.3.1. Апроксимация на дробната производна от параболичния профил

■ Подход 1: Апроксимация за $x=0$

Ние започваме с производната на Riemann-Liouville, отчитайки резултатите на Podlubny [39] (точка 2.7.3-стр.97) и разглеждайки ${}_{RL} D_t^\mu (1 - \xi)^n$ като дробна производна от сложна

функция защото $V(t) = [1 - \xi(\delta(t))]^n$. В този случай

$${}_{RL}D_t^\mu V(t) = \frac{t^{-\mu}}{\Gamma(1-\mu)} V(t) + \sum_{k=1}^{\infty} \binom{\mu}{k} \frac{t^{k-\mu}}{\Gamma(k-\mu+1)} V^{(k)}(t) \quad (24)$$

Производната от k -th ред на $V^{(k)}(t)$ може да се определи чрез формулата на Faa di Bruno [39,43], което води до следния резултат

$$\begin{aligned} {}_{RL}D_t^\mu V(t) &= \frac{t^{-\mu}}{\Gamma(1-\mu)} V(t) + \\ &+ \sum_{k=1}^{\infty} \binom{\mu}{k} \frac{k! t^{k-\mu}}{\Gamma(k-\mu+1)} \times \\ &\times \sum_{m=1}^k V^{(m)}(t) \mathcal{W}^{(k)}(\delta(t)) \sum_{r=1}^k \frac{1}{a_r!} \left(\frac{\delta^{(r)}(t)}{r!} \right)^{a_r} \end{aligned} \quad (25)$$

Сумата на втория член в (25) се разпространява върху всички възможни комбинации от положителни цели стойности (non-negative integer values) на $a_1, a_2, \dots, a_k$, така че

$$\sum_{r=1}^k r a_r = k \quad \text{и} \quad \sum_{r=1}^k a_r = m. \quad \text{От дефиницията на}$$

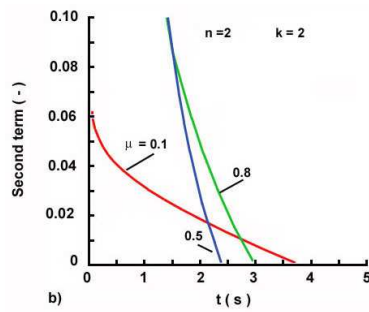
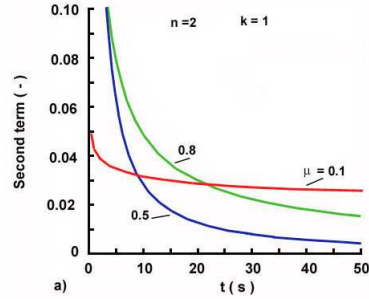
апроксимиращия профил (3), вторият член (произведението от редове) в (24) и (25) включва производни на $\delta(t)$, а по-точно като пример:

$$V^{(1)} = n(1-\xi)^{n-1} \left(x/\delta^2 \right) \delta_t \quad (26a)$$

$$\begin{aligned} V^{(2)} &= n(1-\xi)^{n-2} \left(x/\delta^2 \right)^2 \delta_t^2 + \\ &+ n(1-\xi)^{n-1} \left(-2x/\delta^3 \right) (\delta_t)^2 + \\ &+ n(1-\xi)^{n-1} \left(-x/\delta^2 \right) \delta_{tt} \end{aligned} \quad (26b)$$

$$\delta_t \equiv (\mu/2)t^{\mu/2-1}, \quad \delta_{tt} \equiv (\mu/2)(\mu/2-1)t^{\mu/2-2}$$

за $0 < \mu < 1$, etc.. (26c)



Фиг. 2. Оценка на влиянието на втория член от дробната по време производна ат апроксимиращия профил разглеждан като сложна функция (виж уравнение 31b). а) Един член от реда, $k=1$; б) Два члена от реда, $k=2$

а) Един член от реда, $k=1$; б) Два члена от реда, $k=2$

Когато $\mu < 1$, членовете в сумата (за $k \geq 1$) (26b) имат знаменатели с бързо нарастващи степени на t и следователно тези членове бързо намаляват и стават пренебрежими в сравнение с първия член ($k=0$), които е пропорционален само на $t^{-\mu}$. Като подкрепа на тази гледна точка, вторият член на (31b) за $k=1$ и $k=2$ е представен графично на Фиг.2a,b. С цел ясното и простота на изчисленията, ние използваме предварително зададена експонента на профила $n=2$ и приемаме $D_\mu=1$, без загуба на общност. Нарастване на дробния порядък μ

води до увеличаване на тежестта на втория член в (31b), докато увеличаването на броя на членовете в редовете (k) води до бързо намаляване на този член, и от практическа гледна точка той може да се пренебрегне, каквото е допускането в следващия анализ. Ние ще дискутираме по-нататък ефектът от това допускане върху грешката от апроксимация.

Както е отбелязано от Oldham and Spanier [44], сложността на дефиницията (25) (или 26) практически прави невъзможно нейното използването. В конкретния случай, разглеждан тук, пълният израз (26) води до огромни по размер изрази относно ${}_{RL}D_t^\mu V(t)$

Само че, на нас ние необходима удобна функция, която да позволява лесни изчисления на функцията на грешката $R_{RL}(\xi, t)$ (и мотивирани от числените симулации на Фиг.2, също), поради което ние пренебрегваме втория член в (26). **Следователно, ние допускаме, че производната ${}_{RL}D_t^\mu V(t)$ се апроксимира само чрез члена за $k=0$, а именно:**

$${}_{RL}D_t^\mu V(t) \approx \frac{t^{-\mu}}{\Gamma(1-\mu)} V(t) \quad (27)$$

Това е резултат, който в голяма степен е физически мотивиран, отколкото добре доказан математически и ние ще го коментираме по-нататък в тази точка. Преди всичко, **тази стъпка нарушава основните правила на дробното смятане, но ние ще демонстрираме в следващата точка, че това е специален случай на Подход 2.**

Следователно, с (27) функцията на остатъчната грешка се представя като

$$R_{RL}(\xi, t)_1 \approx \left[\frac{(1-\xi)^n}{\Gamma(1-\mu)} t^{-\mu} - \frac{D_\mu n(n-1)(1-\xi)^{n-2}}{\delta^2} \right] \quad (28)$$

По-нататък, използвайки основната зависимост между левите производни на Riemann-Liouville и Caputo [39, 45, 46]

$${}_CD_{a+}^\mu f(t) = {}_{RL}D_{a+}^\mu f(t) - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{f^{(k)}(a)}{\Gamma(k-\mu+1)} (t-a)^{k-\mu}$$

и нулевите начални условия ($a=0$):

$$f(a) = f'(a) = f''(a) = \dots = 0, \quad \text{така че}$$

$$f(t=0) = V(\xi, t=0) = u(x, t=0) = 0 \quad \text{получаваме}$$

$${}_CD_{a+}^\mu f(t) = {}_{RL}D_{a+}^\mu f(t).$$

Тогава, следвайки (27) ние допускаме, че апроксимациите на двете производни от параболичния профил са еднакви, а именно:

$${}_CD_{0+}^\mu V(\xi, t) = {}_{RL}D_{0+}^\mu V(\xi, t) \approx \frac{t^{-\mu}}{\Gamma(1-\mu)} V(t) \quad (29)$$

Следователно, функциите на остатъците са също еднакви: $R_C(\xi, t)_1 = R_{RL}(\xi, t)_1$ и минимизацията по отношение на n (използвайки израза (34) за зададени стойности на μ) трябва да определи n_{opt} . **Тази практическа стъпка при апроксимацията на дробната по време производна ще бъде лесно доказана при сравнение на приближените решения с точните, както и при използване на подхода *solvitur ambulando* SAP).** (This practical step in approximation of the time-fractional derivative will be easily proved by comparison of approximate solutions based on this assumption with the exact ones as well as by application of the *solvitur ambulando* principle, SAP). В допълнение, на

границата $x = 0$, което означава за $\xi = 0$ (31a), апроксимациите (27) и (29) се редуцират до първия член в (18), който обаче е коректно получен.

- **Подход 2:** Развитие в ред на дробната производна по отношение на ξ

Тъй като **Подход 1** формално нарушава правилата на дробното диференциалното смятане, ние ще приложим една алтернативна стъпка. Нека допуснем, че апроксимиращия профил в пространството ξ е $V(\xi) = (1 - \xi)^n$ и той може да се апроксимира със сходящ ред $V_a(\xi) \approx \sum_{k=0}^N b_k \xi^k$, $0 \leq \xi \leq 1$. Тогава, функцията на остатъчната грешка може да се апроксимира като

$$R_{RL}(\xi, t)_2 = \left[{}_{RL}D_t^\mu \sum_{k=0}^N b_k \xi^k - \frac{D_\mu n(n-1)(1-\xi)^{n-2}}{\delta^2} \right] \quad (30)$$

Развитието в ред, на $(1 - \xi)^n$, направено чрез Maple (само до $N = 3$ като илюстративен пример) е

$$V_a(\xi) \approx 1 - n\xi + \frac{1}{2}n(n-1)\xi^2 - \frac{1}{6}n(n-1)(n-2)\xi^3 + O(\xi^4) \quad (31)$$

Тъй като $\xi \equiv (x/\sqrt{D_\mu})t^{-\mu/2}$, следва, че редът (31) може да представи като

$$V_a(\xi) \approx 1 - n \frac{x}{\sqrt{D_\mu} F_n} t^{-\frac{\mu}{2}} + \frac{1}{2}n(n-1) \left(\frac{x}{\sqrt{D_\mu} F_n} \right)^2 t^{-\mu} - \frac{1}{6}n(n-1)(n-2) \left(\frac{x}{\sqrt{D_\mu} F_n} \right)^3 t^{-\frac{3}{2}\mu} \quad (32)$$

Тъй като всички членове са функции на времето, то за всеки един имаме ${}_{RL}D_t^\mu (b_k t^{\lambda}) = b_k [\Gamma(1 + \lambda)/\Gamma(1 + \lambda - \mu)] t^{\lambda - \mu}$, а от тук следва, че :

$${}_{RL}D_t^\mu V(\xi) \approx \sum_{k=0}^N c_k t^{k - \mu}, \quad c_k = b_k [\Gamma(1 + k)/\Gamma(1 + k - \mu)] \quad (33)$$

Сега, отново, нека преобразуваме (33), така че всеки член да бъде степен на ξ , а именно :

$${}_{RL}D_t^\mu V_a(\xi) \approx \Phi(n, \xi, \mu) t^{-\mu}, \quad \Phi(n, \xi, \mu) = \sum_{k=0}^N c_k \xi^k \quad (34)$$

Следователно, функцията на остатъка може да се представи като

$$R_{RL}(\xi, t)_2 \approx \left[{}_{RL}\Phi(n, \xi, \mu)_2 t^{-\mu} - \frac{D_\mu n(n-1)(1-\xi)^{n-2}}{\delta^2} \right] \quad (35)$$

Важно е да се отбележи, че на границата $x = 0$ ($\xi = 0$), апроксимацията (35) е равна на (24) и (27), и се редуцира до първия член на (18). Следователно резултатите (27) и (29) са апроксимации на дробната по време производна за $x = 0$ ($\xi = 0$). Следователно, техниката приложена в **Подход 2** за $N = 0$ съвпада с **Подход 1**. За последващото третиране на $R_{RL}(\xi, t)_2$ е добре да се използва факта, че производенето $t^{-\mu} \delta^2$ не зависи от времето.

С производна на Caputo от $V_a(\xi) \approx \sum_{k=0}^N b_k \xi^k$, използвайки (39) и избягвайки дълги изрази, получаваме ${}_CD_t^\mu V_a(\xi) \approx {}_C\Phi(n, \xi, \mu)_2 t^{-\mu}$. Лесно се проверява,

че $[\text{RL} \Phi(n, \xi, \mu)_2 - {}_c \Phi(n, \xi, \mu)_2] = 1/\Gamma(1-\mu)$ не зависи от n ; Остатъчната функция $R_C(\xi, t)_2$ има същата конструкция както тази представена чрез (35).

- **Подход 3:** Развитие в ред на всички членове по отношение на ξ

Този подход е модификация на **Подход 2** и използва апроксимирането и на двата члена на остатъчната функция чрез степенни редове $V_a(\xi) \approx \sum_{k=0}^N b_k \xi^k$. За дифузионния член имаме

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} V_a(\xi) \approx \frac{\partial^2}{\partial x^2} \sum_{k=0}^N b_k \xi^k = \sum_{k=2}^N b_k k(k-1) \xi^{k-2} \left(\frac{d\xi}{dx} \right)^2 \quad (36)$$

С производната $d\xi/dx = (1/\sqrt{D_\mu F_n}) t^{-\mu/2}$ всеки член на (36) е пропорционален на $t^{-\mu}$. Тогава дифузионния член на остатъчната грешка може да се представи във вида

$$D_\mu \frac{\partial^2}{\partial x^2} V_a(\xi) \approx D_\mu \Psi(\xi, n, \mu) t^{-\mu} \quad (37)$$

$$\Psi(\xi, n, \mu) \approx \sum_{k=2}^N b_k k(k-1) \xi^{k-2} \left(\frac{1}{F_n^2} \right) = \quad (38a, b)$$

$$\sum_{k=0}^N b_{k+2} (k+1)(k+2) \xi^k \left(\frac{1}{F_n^2} \right) = \sum_{k=0}^N d_k \xi^k$$

$$d_k = b_{k+2} \frac{(k+1)(k+2)}{F_n^2} \quad (38c)$$

Сега, остатъчната функция, използвайки версията (38b) с транслиран индекс в сумата, се апроксимира като

$$\begin{aligned} R_{RL}(\xi, t)_3 &\approx D_\mu [\text{RL} \Phi(n, \xi, \mu)_2 - \Psi(\xi, n, \mu)] t^{-\mu} = \\ &= D_\mu \left[\sum_{k=0}^N (c_k - d_k) \xi^k \right] t^{-\mu} \end{aligned} \quad (39)$$

3.4. Определяне на оптималната експонента:

3.4.1. Оптимална експонента чрез Подход 1

Резултатът от интегрирането в $\int_0^1 [R_{RL}(\xi, t)_1]^2 d\xi$ може да се представи като $E_{M(DIM)_1} = e_{M(DIM)_1}(n, \mu) / t^{2\mu}$. Функцията $e_M(n, \mu)$, трябва да се минимизира по отношение на n

Оптималните експоненти определени чрез **Подход 1** са много близки до тези определени на границата. Това е очакван резултат, защото и в двата случая дробната по време производна се апроксимира за $x=0$. Всъщност, в първия случай експонентите се определят от $R_{RL}(\xi, t)_1 = 0$ за $\xi=0$. С **Подход 1**,

ние минимизираме $\int_0^1 [R_{RL}(\xi, t)_1]^2 d\xi$, където

$R_{RL}(\xi, t)_1$ е конструирана с ${}_{RL} D_t^\mu u_a(0, t) = {}_{RL} D_t^\mu V(0, t)$, което е специален случай на **Подход 2**.

3.4.2. Оптимални експонента чрез Подход 2

От (30) и апроксимацията (35), средноквадратичната функция на грешката

$$E_{M(DIM)_2} = \int_0^1 [R_{RL}(\xi, t)_2]^2 d\xi$$

може да се представи като $E_{M(DIM)_2} = e_{M(DIM)_2}(n, \mu) / t^{2\mu}$, където

$$e_{M(DIM)^2}(n, \mu) = \int_0^1 \left[\frac{\Phi(\xi, \mu) F_n^2 - n(n-1)(1-\xi)^{n-2}}{F_n^2} \right]^2 d\xi \quad (40)$$

Тук, ние получаваме нова задача за разрешаване:

Колко члена от $\Phi(\xi, \mu)$ трябва да се използват при определяне на n_{opt} ? . Оптималните експоненти представени в Таблица 2 са определени чрез минимизация на (36) по отношение на n , за различни стойности на μ в два случая: $N = 2$, т.е. 3 члена на реда, и $N = 3$ (4 члена на реда).

3.4.3. Оптимални експоненти чрез Подход 3

При Подход 3 Стойностите на n за различни μ са събрани в Таблица 2. Те са твърде близки до експонентите определени за $x=0$ ($\xi=0$) с условието $R(n, \xi, \mu) = 0$

Определянето на $\int_0^1 [R_{RL}(\xi, t)]^2 d\xi$ като

функция на n и μ , и последващата минимизация водят до стойностите на n събрани в Таблица 2. Резултатите представени в Таблица 2 изпълняват условието $n > 2$ и се стремят към $n = 2$ за $\mu \rightarrow 1$

По-нататък, числените експерименти за $N = 4$ (5 члена от апроксимиращия ред) водят до стойностите на оптималните експоненти в последната колона на Таблица 2. Тези резултати демонстрират неустойчивост (blow-up) на функцията на грешката при $\mu = 1/2$.

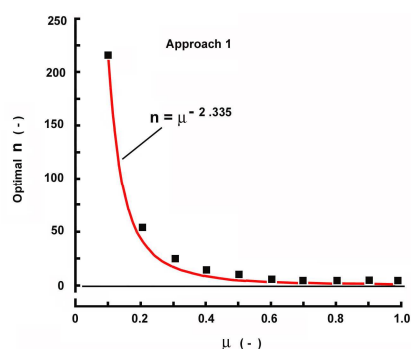
3.4.4. Апроксимация на $n(\mu)$ като степенна функция

Използвайки получените числени данни за $n(\mu)$ съответстващи на $x = 0$ (100 точки) от уравнение (26b) се получава $n(\mu)_{x=0} \approx \mu^{A_0}$, $A_0 = -2.387 \pm 0.00976$, $0.1 \leq \mu \leq 0.99$ (41) с $\chi^2 = 30.625$ и $R^2 = 0.9946$, като параметри на апроксимацията.

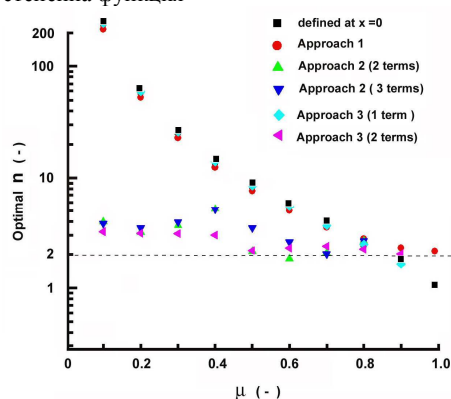
Таблица 2 . Оптимални експоненти на профила определени чрез Подход 3

	N=0	N=1	N=2	N=4
μ				
0.1	241.870	1.314	3.212	2.413
0.2	59.492	1.195	3.113	2.43
0.3	25.718	1.080	3.090	2.521
0.4	13.897	0.966	2.997	1.360
0.5	8.423	0.854	2.156	*
0.6	5.447	0.741	2.276	1.349
0.7	3.647	0.627	2.374	0.785
0.8	2.468	0.506	2.222	1.532
0.9	1.640	0.372	2.02	1.424
*- impossible determination of the optimal exponent due to blow-up of the residual function				

Следователно, когато определянето на оптималната експонента n е възможно само за определени стойности на μ , ние предлагаме един практичен подход: Да се използва степенната функция $n = \mu^A$ за да се апроксимират съществуващите данни или да се екстраполират функцията $n(\mu)$ за намиране на отсъстващите експоненти. Експонентите определени по този начин са представени в Таблица 3.



Фиг. 3. Апроксимация на оптималните експоненти чрез степенна функция



Фиг 4. Оптимални експоненти определени чрез различни подходи в по-логаритмични координати, като функция на дробния порядък.

Всъщност, на практика, това е **Подход 4** използван в това изследване. Порядъка на тези експоненти (за областта $0.2 < \mu < 1$) е същият

като на експонентите определени с **Подход 1** и **Подход 2**, за $N > 0$, и всички те се сходят към $n = 2$ когато $\mu \rightarrow 1$ (виж Фиг. 4)

3.4.5. Метод със свободно търсене (Solvitur ambulando approach)

Като допълнителна възможност за определяне на оптималните експоненти, е направен още един опит с използване на метода на свободно търсене, а по точно с метода *solvitur ambulando* (SA), който използва числени тестове с вариация на експонентата n (за дадена стойност на μ и сравнение на резултата с точното решение -виж уравнение (60). Единствените критерии при използване на метода SA е да се получат апроксимации с минимални абсолютни грешки, спрямо точното решение, а именно (за зададено μ и пременящо се n)

$$PWE(n, \mu) = \text{abs}[M(\eta, \mu) - u_a(n, \mu)]$$

$$\mu = \text{const.}, n = \text{var.}, n \geq 2$$

Процедурата използва прост алгоритъм. Изходната точка е или $n = 2$ или експонента определена при $x = 0$. След това, варирайки n , с малки инкременти, ние можем да изчислим $PWE(n, \mu)$ и следователно да определим $\max PWE(n, \mu)$, така като е направено в експериментите представени на Фиг.5,a,b,c. Следователно, критерият на цикличната процедура е да определи стойността на n където съществува минимална стойност на $\max PWE(n, \mu)$. Това е оптималната експонента n за зададено μ .

Таблица 3. Оптимални експоненти на профила определени с подхода (SA) и абсолютните грешки като критерии

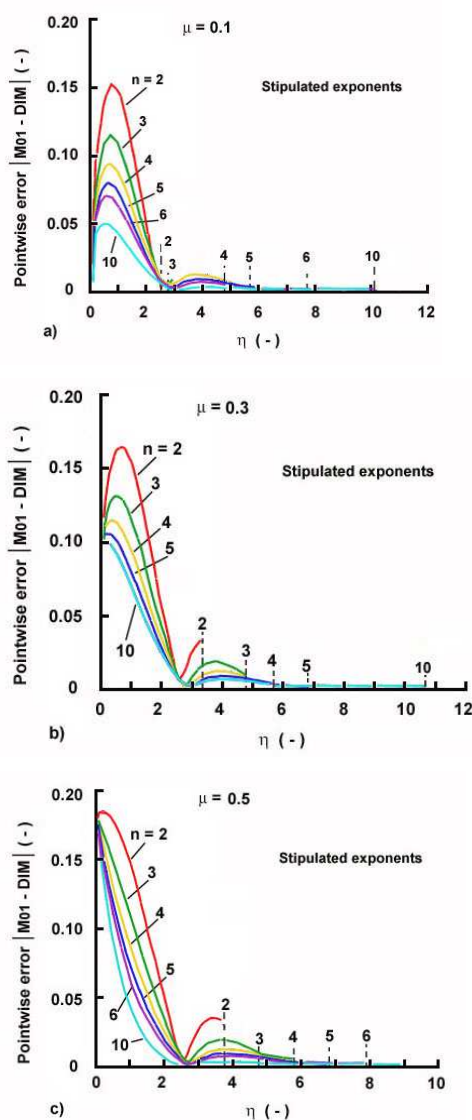
μ	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
$n_{opt}(DIM)$	75.506	42.3	26.675	9.375	6.10	3.555	2.470	2.415	2.154
Maximum Pointwise error	0.035	0.0075	0.043	0.0426	0.0301	0.0327	0.0512	0.116	0.186

Експонентите определени по този начин са представени в Таблица 3. Определено, тези експоненти се различават от стойностите определени с разглежданите преди това подходи, защото критериите за точност са на апроксимацията са различни. Независимо от това, може да се отбележи, че поведението на тези експоненти (виж Таблица 3) е, че те се стремят към експонентите на приближеното решение, когато $\mu \rightarrow 1$, т.е. $n \rightarrow 2$.

3.4.6. Кой подход, за определяне на оптималната експонента, е коректен?

Анализът и изчисленията проведени тук, за да се определи оптималната експоната на приближеното решение, използват различни подходи при апроксимацията на дробната производна от апроксимиращия профил. Това е основният момент на оптимизационната процедура. Преди всичко, минимизационната процедура определя оптималната експонента по един единствен критерий: *остатъчната функция да бъде минимална, но като правило тези стойности не изпълняват дифузионното уравнение за $x = 0$.*

С **Подход 2** ние получихме успешна минимизационната процедура с членове на апроксимиращия ред (на дробната производна) до $N = 2$. От друга страна, при **Подход 3** ние имаме частичен успех за $N = 2$.



Фиг. 5. Числени експерименти с зададени експоненти (от цял порядък) на апроксимиращия профил.

а) За $\mu = 0.1$; б) За $\mu = 0.3$; в) $\mu = 0.5$.

Бележка: Вертикалните пунктири маркират края на интегралните решения. The vertical dotted lines mark the end of the integral-balance solution.

Обяснението е, че при **Подход 2**, пространствената производна $\partial^2 u_a / \partial x^2$ се представя директно чрез апроксимацията профил и минимизационната процедура е според (40). Но при **Подход 3**, на нас са ни нужди твърде много членове, за да апроксимираме чрез ред тази производна, така че тя да се сходя достатъчно точно към функцията $n(n-1)(1-\xi)^{n-2}$. За разлика от тези тежки изчисления, макар и математически коректни, техника използвана при **Подход 1** е по-проста и работи адекватно когато $\mu < 0.5$; това ще бъде демонтирано при сравнителните числени експерименти (точка 4.2) и коментирано в точка 4.3.

Единственият разрешен случай, когато трите подхода са приложими е този за $x=0$ ($\xi=0$), т.е. когато експонентата се калибрира на границата; в тази точка дифузионното уравнение и интегралното съотношение се изпълняват едновременно. Освен това, този подход ни дава идеята за основната зависимост $n(\mu) \approx \mu^A$.

4. Сравнение с точните решения

4.1. Точно решение

В тази точка са представени числени симулации на получените приближение решения и тяхното сравнение със съществуващите точни такива. Точното решение на уравнение (1), с производна на Caputo, може да бъде представено чрез функцията на Mainardi $M(\eta, \mu/2)$ [35] във формата: $u \equiv pM(\eta; \beta)$, където $\beta = \mu/2$ и $0 < \beta < 1$.

$$M(\eta, \mu) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \eta^k}{k! \Gamma[-\mu k/2 + (1 - \mu/2)]},$$

$$0 < \mu/2 < 1 \quad (42)$$

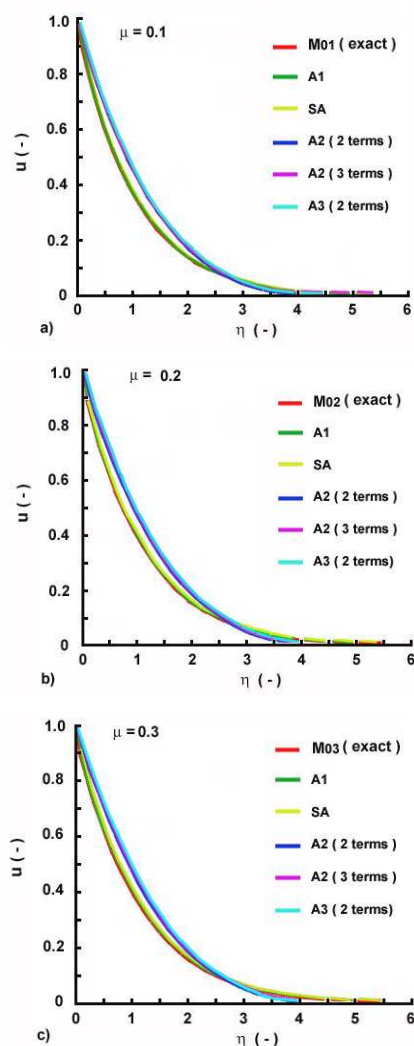
Автомоделната променлива използвана в $M(\eta, \mu/2)$ е $\eta = x/\sqrt{D_\mu t^\mu}$ ($0 < \mu < 1$), докато $p \equiv 1/M(0, \mu)$ е константа определяна от условието приложено за $x = \eta = 0$. Функцията на Mainardi $M(\eta, \mu)$ е частен случай на функцията на Wright [7,49].

В това сравнително изследване ние използваме факта, че ако началните условия са нулеви, то производните на Riemann-Liouville и Caputo съвпадат, което позволява да се сравнява интегралното решение с точното (60): използвайки ограничен брой членове от реда $M(\eta, \mu) = \sum_{k=0}^N [k, \eta, \mu]$, за $N = 250$ (изчисления проведени с Maple 13) следвайки правилата за пресмятане на функцията на Mittag-Leffler [50].

4.2. Сравнителни тестове с DIM решения (с оптимални експоненти)

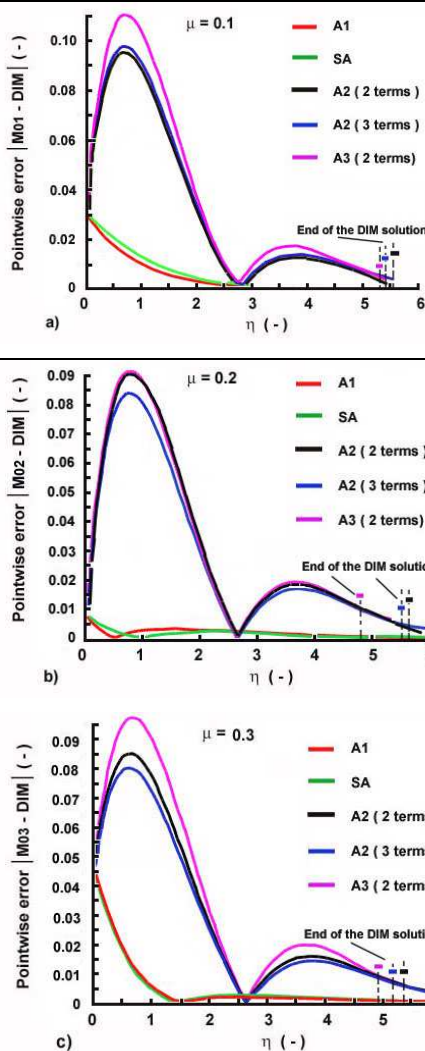
Сравнителните тестове показани на Фиг. 6a,b,c ясно показват, че за $0 < \mu \leq 1/3$ приближените профили са твърде близко до точните решения и визуално кривите са неразличими. За тези случаи абсолютните грешки (виж Фиг 7a,b,c) са в границите $(2-5) \times 10^{-2}$ за $0.1 < \mu < 0.3$, когато експонатите са определени чрез **Подход 1** и метода *solvitur ambulando*.

За експонатите определени чрез **Подход 2** или **Подход 3**, максималните абсолютни грешки са в границите $(9 \div 10) \times 10^{-3}$ за малки η .



Фиг. 6. Приблизени решения за малки стойности на дробния порядък μ

- a) За $\mu = 0.1$;
- b) За $\mu = 0.2$;
- c) За $\mu = 0.3$



Фиг. 7. Абсолютни грешки на приближените решения (Фиг.6) за малки стойности на дробния порядък μ .

- a) За $\mu = 0.1$;
- b) За $\mu = 0.2$;
- c) За $\mu = 0.3$

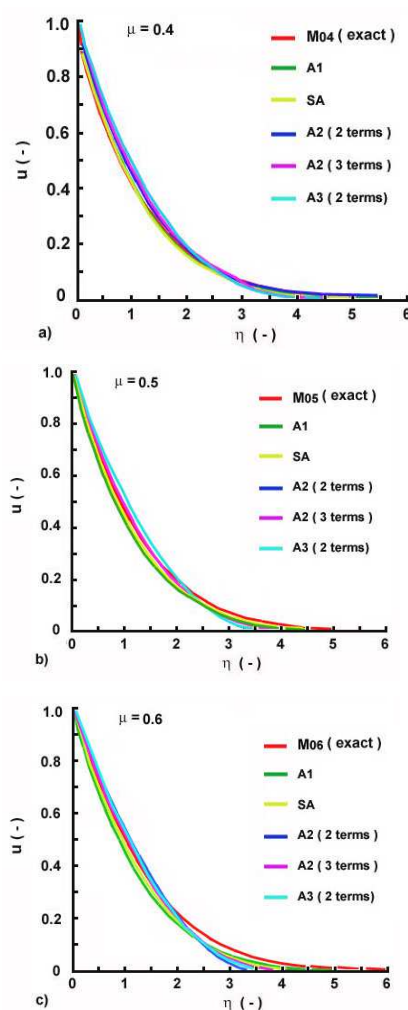
Приемливите абсолютни грешки за тези решения са в зоните в близост до фронта на дифузионния слой, където $\eta = F(n, \mu)$ (точките маркирани с вертикални пунктири на всички фигури). Приложимостта на **Подход 1** в тези случаи може да се обясни със слабия ефект от втория член в на дробната производна от апроксимиращия профил

и числените експерименти на Фиг.2а. Само, че този ефект не може да се пренебрегва с увеличаване на дробния порядък μ , както това ще бъде коментирано след малко

При увеличаване на μ , реално за $0.3 < \mu < 0.6$, обаче, разликите между приближените и точните решения са различни (виж Фиг. 8a,b,c); приближените решения са разположени под точните и абсолютните грешки са в границите $(1-5) \times 10^{-2}$ (виж Фиг. 9a,b,c), с изключение на случаите, когато експонентите са определени чрез **Подход 3** (случаят за $\mu = 0.4$).

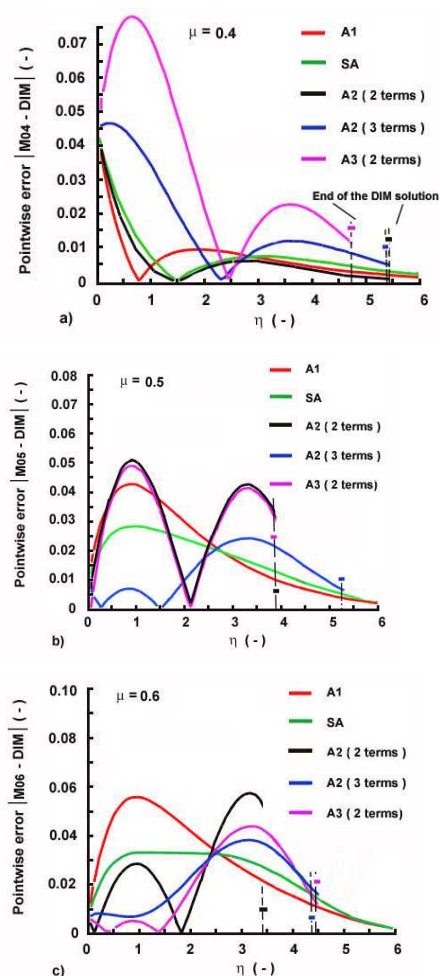
Важно е да се отбележи, че за големи η ние виждаме вътрешно присъщото свойство на интегралния метод: дълбочината на проникване (всъщност точката съответстваща на $\eta/F(n, \mu) = 1$) е по-къса от дистанцията, където точното решение, ако съществува, изчезва и може практически да се приеме за равно на нула. За решенията съответстващи на тази група, по-точно за $0.7 < \mu < 0.9$, всички интегрални решения са разположени под точните (виж Fig. 10a,b,c). Максималните абсолютни грешки за решенията чрез DIM с експоненти определени с **Подход 1** и **Подход 2**, салто и тези определени чрез **SA** могат да достигнат стойности от порядъка на 10^{-2} за $\mu = 0.7 - 0.8$, но средните абсолютни грешки са от порядъка 5×10^{-2} (виж Fig.11a,b,c). За примера показан на Fig.11c, голямата разлика между точното и приближеното решение може да достигне стойности от порядъка на 20×10^{-2} . За да се обяснят тези големи

грешки за големи стойности на η , ние повтаряме отново че *интегралното решение свързва в точката където неговата крива пресича абсцисата, това е точката дефинирана от дълбочината на проникване δ и решението не съществува след тази точка* [25,26,36,38]



Фиг. 8. Приблизени решения за умерени стойности на дробния порядък μ

- a) За $\mu = 0.4$;
- b) За $\mu = 0.5$;
- c) За $\mu = 0.6$



Фиг. 9. Абсолютни грешки на приближените решения за умерени стойности на дробния порядък μ .

a) За $\mu = 0.4$;

b) За $\mu = 0.5$;

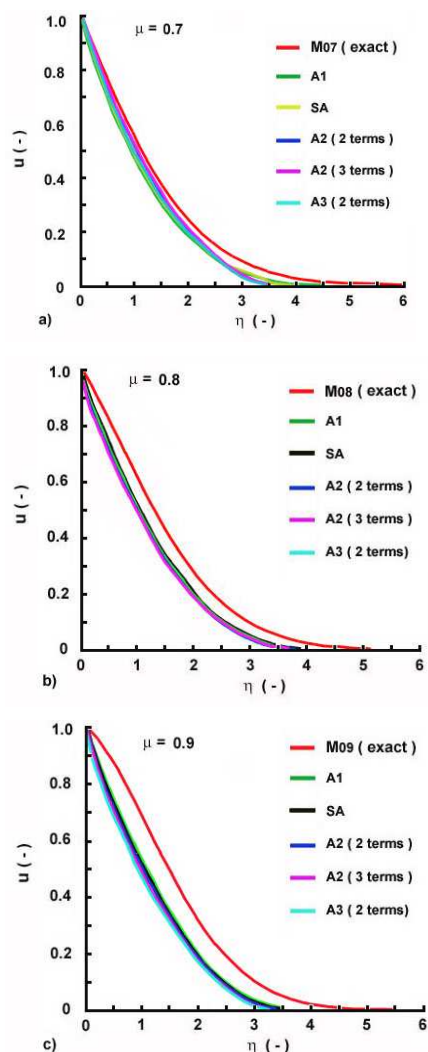
За $\mu = 0.5$.

По отношение на точното решение, е важно да се отбележи, че не е ясно къде неговата опашка за големи η свършва. Този проблем е добре известен от решенията на нормалното дифузионно уравнение ($\mu = 1$), където решението представено посредством Гаусовата функция на грешката, се получава директно от $M(\eta, 1)$ (виж

(39) и коментарите на Sharma and Jain [51] и Peng and Li [52].

4.3. Оценка на оптималните експоненти

Напълно резонно е да се направи оценка на методите за определяне на оптималните експонати и да се реши кой е коректният подход. Сравнителните тестове ясно показват, че за $\mu < 0.5$ най-простият метод е **Подход 1**, защото абсолютните грешки са по-малки от 0.05. В този случай, ние трябва да погледнем Фиг.2a,b, където втория член в (31b) за $\mu = 0.1$ може да се пренебрегне защото намалява бързо с времето достигайки стойности по-малки от 0.05. За междинни стойности на дробния порядък $0.4 < \mu < 0.7$, всички методи определят експоненти водещи до приближени решения с абсолютни грешки в границите $(2-5) \times 10^{-2}$. Тъй като **Подход 1** може да предизвика определено объркване сред ортодоксалните читатели, защото той нарушава правилата на дробно-диференциалното смятане, то тогава експонентите определени чрез **Подход 2** водят до решения (чрез DIM) с приемливи абсолютни грешки (виж Фиг.9a,b,c и Фиг.11a). За големи $\mu \rightarrow 1$ (виж Фиг.9b,c и Фиг.11b,c) всички методи определят експоненти водещи до DIM решения с приемливи грешки ($< 5 \times 10^{-2}$) в два тесни диапазона: за $\eta < 0.5$ (в близост до границата $x = 0$) и за $3 < \eta < 5$ в близост до фронта дефиниран от $F(n, \mu)$.

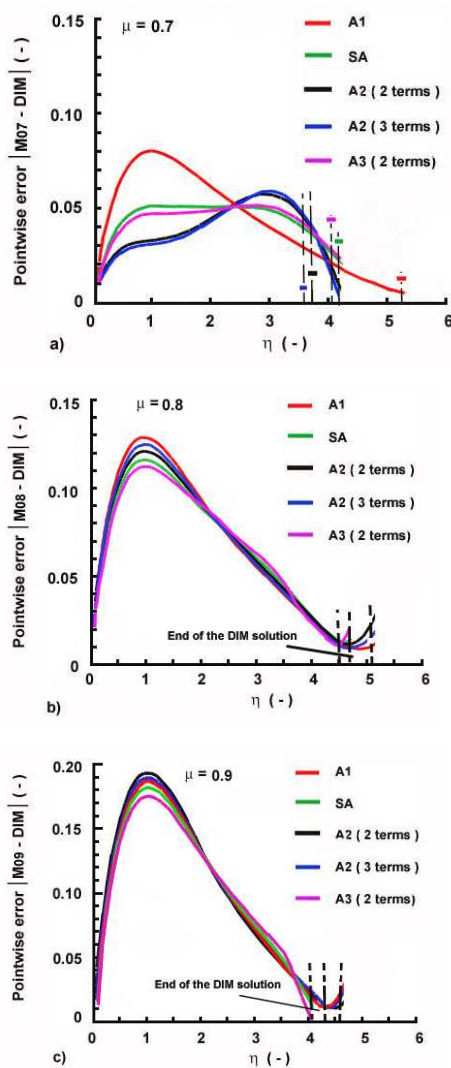


Фиг. 10. Приблизени решения за големи стойности на дробния порядък μ

- а) За $\mu = 0.7$;
- б) За $\mu = 0.8$;
- в) За $\mu = 0.9$

Като заключение, Подход 1 е лесен и прост, и работи адекватно за малки μ , където дробната (по време) производна се променя във времето толкоз бавно, че нейното поведение прилича на поведението на константа, поведение, което не може да се наблюдава за големи стойности на μ .

В допълнение, Подход 2, с до 4 члена от сходящия ред апроксимиращ дробната производна, работи задоволително за всички стойности на дробния порядък $0 < \mu < 1$.



Фиг. 11. Абсолютни грешки на приближените решения за големи стойности на дробния порядък μ .

- а) За $\mu = 0.7$;
- б) За $\mu = 0.8$;
- в) За $\mu = 0.9$

5. Приблизени разпределения: примери на DIM решения

След сравнителните процедури, основният въпрос, който възниква е: *Възможно ли е с помощта на DIM решения да се прави анализ на моделираната физична ситуация?* Поставеният въпрос е естествен, защото точното решение (42) представено като функция на автомоделната променлива η не позволява това да бъде направено. В този контекст, ние разглеждаме три основни проблема:

i) Разпределения (приблизени решения) като функция на автомоделната променлива

η (или координатата ξ) и ефекта на дробния порядък μ върху тях.

ii) Разпределения представени чрез физичните координати x и t .

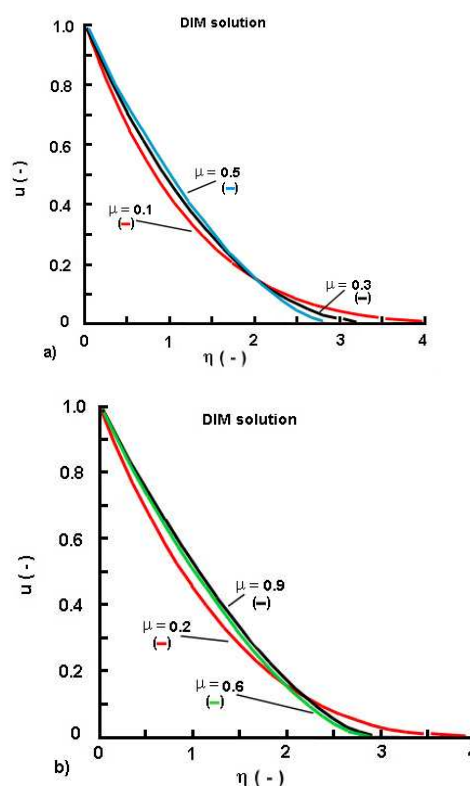
5.1. Разпределения като функция на автомоделната променлива

За простота на представяне на резултатите, при всички изчисления е прието $D_\mu = 1$. Това е математически коректен подход, широко използван в литературата, не зависимо от това, че порядъка на D_μ е твърде различен, както беше коментирано във връзка с дълбочината на проникване.

Примери за разпределения генерирани от приблизени DIM решения на субдифузионното уравнение, за различни $0 < \mu < 1$ (и съответни оптимални експоненти определени с **Подход 2** (е члена от апроксимиращия ред)) са показани на Фиг.12a,b чрез автомоделната променлива

$\eta = x / \sqrt{D_\mu t^\mu}$, като независима променлива.

Ефектът на ретардация върху развитието на дифузионния процеса, математически представен чрез дробния порядък μ , е добре демонстриран от разпределението на профилите по дължина на абсцисата.



Фиг. 12. Приблизени DIM решения като функция на автомоделната променлива η . Оптимални експоненти определени с Подход 2 (3 члена от апроксимиращия ред): а) Случаи за $\mu = 0.1$, $\mu = 0.3$ и $\mu = 0.5$; б) Случаи за $\mu = 0.2$, $\mu = 0.6$ и $\mu = 0.9$

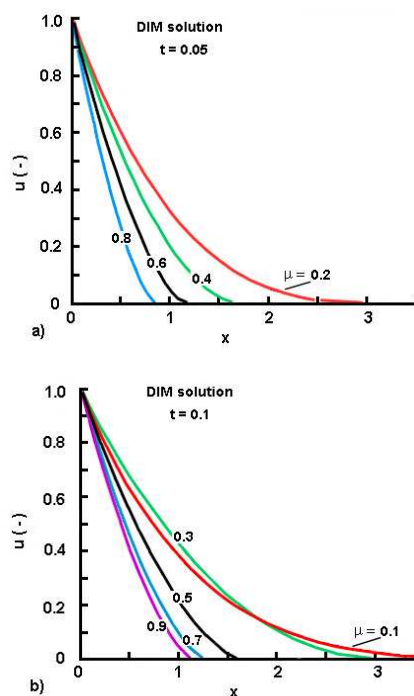
В термини на дифузията моделирана с дробно-диференциални оператори, *по-късата дълбочина на проникване означава, разпределения с къси „опашки“ с нарастване на $\mu \rightarrow 1$, докато*

големите дълбочини на проникване съответствуват на разпределения с дълги „опашки“, когато μ се отклонява от 1 и $\mu \rightarrow 0$.

5.3. Разпределения представени чрез физическите променливи x и t

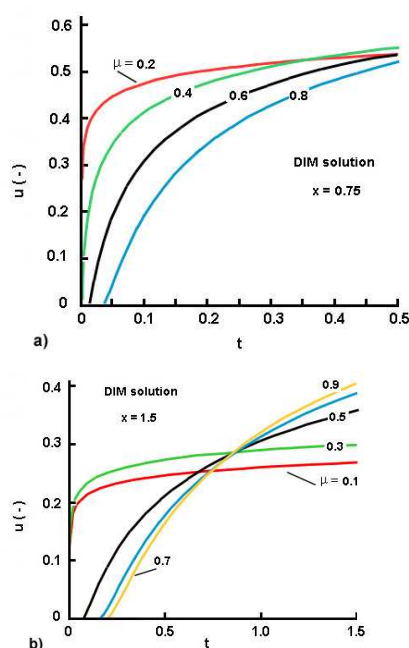
Когато надлъжното разпределение на решението е представено за фиксиран момент от време (виж Фиг. 13a,b), имаме по-бърз дифузионен процес, и съответно по-си дълбочини на проникване, за големи стойности на μ , което е един физически адекватен резултат. Зависимостта между графиките на Фиг.12a,b и Фиг.13a,b е директна, защото автомоделната променлива $\eta = x / \sqrt{D_\mu t^\mu}$, за фиксиран момент от време t става $\eta \equiv qx$, където $q = 1 / \sqrt{D_\mu t^\mu} = \text{const.}$

В допълнение, физическата база зад субдифузионното уравнение, представяна чрез стойностите на μ , простишко означава, че с намаляване на стойността на дробния порядък, поведението на дифузионния процес все по-силно различава от това следващо закона на Фурие (Фик). Като следствие, генерираните профили се отдалечават от класическото Гаусово разпределение (решение) за $\mu = 1$: „опашката“ на разпределението става по-дълга с намаляване на μ , т.е. когато процесът се отдалечава от Гаусовия модел, и обратно. В контекста на решенията чрез интегралния метод, по-дългите „опашки“ означават по-дълги дълбочини на проникване и по-голямо отклонение от Гаусовия процес на дифузия, и обратно.

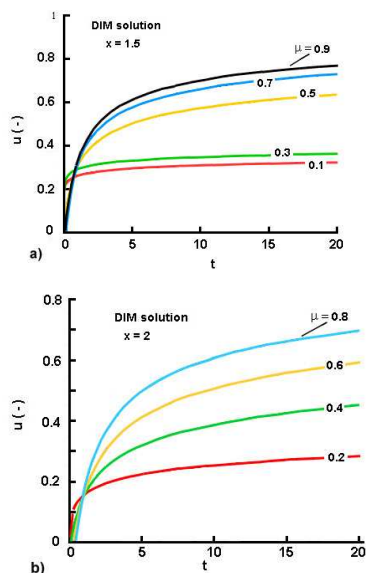


Фиг. 13. Приблизени профили на DIM решения за малки времена като функция на пространствената координата x . Големи дистанции. $D_\mu = 1$. Оптимални експоненти от подход SA .a) $t = 0.05s$; b) $t = 0.1s$.

Алтернативно, временното развитие за къси (Фиг.14a,b) и големи времена (Фиг. 15a,b), несъмнено демонстрират физическата адекватност на получените приближени решения. По-точно, процесът на ретардация, при намаляване на подробния порядък μ , води до по-бързо формиране на плато в кривата на развитие. Физически, този ефект върху скоростта на развитие на решението може да се свърже с факта, че в среди със субдифузионно поведение, затрудненото проникване на дифузанта води до бързо насищане (плато в кривите), за разлика от ситуацията, където за $\mu \rightarrow 1$ разпределението се стреми към Гаусовото решение.



Фиг. 14. Развитие във времето на приближени DIM решения за фиксирани дистанции измервани от границата $x=0$ за малки времена. $D_\mu=1$. Оптимални експоненти определени Подход 2 (3 члена от апроксимирания ред). а) $x=0.75$; б) $x=1.5$.



Фиг. 15. Развитие във времето на приближени DIM решения за фиксирани дистанции измервани от границата $x=0$ за големи времена. $D_\mu=1$. Оптимални експоненти от подход SA. а) $x=1.5$; б) $x=2$.

ИЗВОДИ

Тази глава се основава на статия написана с една единствена идея да представи едно ефективно приближено решение, използващо техниката на интегралния метод с двойно интегриране, на дифузионен модел с дробни производни по време. Решенията са получени чрез използване на параболичен профил с недефинирана експонента. Този апроксимиращ профил дава по-голяма свобода за оптимизиране на решението чрез търсене на оптимална експонента, в сравнение със случаите, когато експонентата е предварително зададена или се използват полиномиални профили (квадратичен или кубичен).

Методът с двойно интегриране води директно до лесно аналитично решение в затворена форма, както с производни на Riemann-Liouville тауа и с производни на Caputo. Методът беше демонстриран със задачата на Дирихле, с нулеви начални условия, с цел яснота при излагане на детайлите от технологията на решението.

Основен момент в решението е определянето на оптималната експонента. Преди всичко, като правило, стойностите на оптималните експоненти намаляват с увеличаване на дробния порядък. С използване на различни подходи, резултатите от числените експерименти и с свързаните с тях анализи могат да се обобщят като :

- Решенията чрез DIM демонстрират абсолютни грешки от порядъка на $0.002-0.01$ за дробен порядък в границите $0.1 < \mu < 0.3$, ако

експонентата се определя чрез **Подход 1** (калибриране за $x=0$), **Подход 2** (с 3 члена от апроксимиращия ред) и метода на свободно търсене на експонентата (*solvitur ambulando*).

- С увеличаване на дробния порядък, абсолютната грешка на апроксимацията расте и може да достигне стойности от порядъка на 0.05 за $\mu=0.6$, като пример. За по-високи дробни порядъци, когато μ се стреми към 1, грешката от апроксимацията може да достигне 0.15, но това е вътрешно присъщо свойство всички решения използващи метода на интегралния баланс. За дробен порядък в границите $0.3 < \mu < 0.7$, приемливи грешки на апроксимацията се получават при използване на експоненти определени чрез SA и **Подход 2** (с 3 члена от апроксимиращия ред).
- Независимо от неточността на метода за големи стойности на μ , по-точно за $\mu \geq 0.7$, абсолютните грешки на апроксимацията могат да достигнат стойности от порядъка на 0.15–0.20, независимо от метода използван за определяне на оптималната експонента. Следователно, приближените решения получени чрез DIM, които имат приемливи грешки на апроксимацията, са тези, които са получени за $\mu \leq 0.7$, и качеството на тези решения нараства с намаляване на стойността на дробния порядък.

Важно качество на концепцията за крайна дълбочина на проникване и метода с двойно интегриране е възможността да се получи аналитично решение в затворена форма (to crate closed-form solutions) позволяващи физичен анализ (post-solution analyzes), който, като пример, е невъзможен с точното решение използващи неограничени сходящи редове.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Korabel, N., Klages, R., Chechkin, A.V., Sokolov, I.M., Gonchar, V.Y., Fractal properties of anomalous diffusion in intermittent maps, *Physical Review E* 75 (2007), pp. 1539-3755/2007/75(3)/036213(14).
- [2] Kosztolowicz, T., Subdiffusion in a system with a thick membrane, *Journal of Membrane Science*, 320 (2008), 1-2, pp. 492–499.
- [3] Dokoumetzidis, A., Macheras, P., Fractional kinetics in drug absorption and disposition processes, *Journal of Pharmacokinetics and Pharmacodynamics* 36(2009), 2, pp. 165–178.
- [4] Nigmatullin, R. R., The realization of the generalized transfer equation in a medium with fractal geometry, *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, 133 (1986), 1, pp. 425–430.
- [5] Li, Y., Farrher, G., Kimmich, R., Sub- and superdiffusion molecular displacement laws in disordered porous media probed by nuclear magnetic resonance. *Phys. Rev. E* 74 (2006) (6), article 066309.
- [6] Berkowitz, B., Scher, H., Silliman, S.E., Anomalous transport in laboratory-scale, heterogeneous porous media, *Water Resources Research* 36 (2000), 1, pp. 149–158.
- [7] Povstenko, Y., Fractional heat conduction equation and associated thermal stresses. *J. Thermal Stresses* 28 (2005), 1, pp. 83-102.
- [8] Povstenko, Y., Time-fractional radial diffusion in a sphere. *Nonlinear Dynamics* 53 (2008), 1-2, pp. 55–65.
- [9] Metzler, R., Klafter, J., The random walk's guide to anomalous diffusion: A fractional dynamics approach. *Physics Report* 39 (2000), 1, pp. 1–77.
- [10] Trujillo, J., Fractional models: Sub and superdiffusive and undifferentiable solutions. In: BHV Topping, Montero G and Montenegro R (eds) *Innovation in Engineering Computational Technology*. Stirling, UK: Sax-Coburg Publ., (2006), pp. 371–402.
- [11] Nakagawa, J., Sakamoto, K., Yamamoto, M., Overview to mathematical analysis for fractional

- diffusion equations–new mathematical aspects motivated by industrial collaboration, *Journal of Math-for-Industry* 2 (2010),1,pp. 99-108 .
- [12] Narahari Achar, B.N., Hanneken, J.W., Fractional radial diffusion in a cylinder, *Journal of Molecular Liquids*, 114 (2004),1, pp. 147–151.
- [13] Djordjevic, V.D., Atanackovic, T.M., Similarity solutions to nonlinear heat conduction and Burgers/Korteweg–deVries fractional equations, *Journal of Computational and Applied Mathematics* 222 (2008), 2, pp.701–714 .
- [14] Langlands, T.A.M., Solution of a modified fractional diffusion equation, *Physica A* 367 (2006), pp.136–144.
- [15] Luchko,Y.F., Srivastava. H.M., The exact solution of certain differential equations of fractional order by using operational calculus, *Computers and Math. Application.* 29 (1995),8,pp. 73-85.
- [16] Das, S., Gupta, P.K., Ghosh, P., An approximate analytical solution of Nonlinear Fractional Diffusion Equation, *International Journal of Nonlinear Science* 12 (2011),3, pp.339-346
- [17] Diethelm, K., Ford, J.N., Freed, A.D., Luchko, Y., Algorithms for the fractional calculus: a selection of numerical methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194 (2005),6-8, pp. 743–773.
- [18] Ahmadian, A.; Salahshour, S.; Baleanu, D., Amirkhani, H., Yunus, R., Tau method for the numerical solution of a fuzzy fractional kinetic model and its application to the oil palm frond as a promising source of xylose, *Journal of Computational Physics* 294 (2015) , pp. 562-584.
- [19] He, J.-H., Approximate analytical solution for seepage flow with fractional derivatives in porous media, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 167 ((1998), 1-2, pp.57-68.
- [20] Wu, G.C., Baleanu, D., Variational iteration method for fractional calculus - a universal approach by Laplace transform, *Advances in Difference Equations*, **2013**:18; doi:10.1186/1687-1847-2013-18.
- [21] Al-Rabtah, A., Ertürk, V.S., Momani, S., Solutions of a fractional oscillator by using differential transform method, *Computers and Mathematics with Applications* 59 (2009),3, pp.1356-1362.
- [22] Hristov, J., Heat-Balance Integral to Fractional (Half-Time) Heat Diffusion Sub-Model. *Thermal Science* 14 (2010),2,pp. 291-316.
- [23] Hristov, J., Approximate Solutions to Fractional Subdiffusion Equations: The heat-balance integral method. *The European Physical Journal-Special Topics* 193 (2011),1, 229-243.
- [24] Jafari, J., Tajadodi, H., Baleanu, D., A Numerical Approach for Fractional Order Riccati Differential Equation Using B-Spline Operational Matrix, *Fractional Calculus and Applied Analysis*,18 (2015),2, pp.387–399.
- [25] Goodman, T.R., The heat balance integral and its application to problems involving a change of Phase, *Transactions of ASME*, 80(1958), 1-2, pp.35-342.
- [26] Goodman, T.R., Application of Integral Methods to Transient Nonlinear Heat Transfer, *Advances in Heat Transfer*, ed.T. F. Irvine and J. P. Hartnett, eds., **vol. 1** (Academic Press-San Diego, CA), vol. 1, (1964), pp. 51–122.
- [27] Ozdemir, N., Karadeniz, D., Fractional diffusion-wave problem in cylindrical coordinates, *Physics Letters A* 372(2008),38, pp.5968–5972.
- [28] Dworecki, K., Sleszak,A., Ornal-Wasik, B., Wasik, S., Evolution of concentration field in a membrane system, *Journal of Biochemical and Biophysical Methods* 62 (2005),2, pp. 153–162.
- [29] Dworecki, K., Experimental investigation of the subdiffusion in a membrane system, *Physica A* 359 (2005),1-4, pp. 24–32.
- [30] Hristov, J., Integral-Balance Solution to the Stokes’ First Problem of a Viscoelastic Generalized Second Grade Fluid. *Thermal Science* 16 (2012),2, pp. 395–410.
- [31] Hristov, J., Approximate solutions to time-fractional models by integral balance approach, in: *Fractals and Fractional Dynamics* , ed. C. Cattani, H.M. Srivastava, Xia-Jun Yang,s), (Berlin-De Gruyter Open) , Chapter 5, (2015) ,pp.82-114.
- [32] Volkov, V. N., Li-Orlov, V. K., A Refinement of the Integral Method in Solving the Heat Conduction Equation. *Heat Transfer Sov. Res.* 2 (1970), 2, 41-47.
- [33] Hristov, J., Integral solutions to transient nonlinear heat (mass) diffusion with a power-law diffusivity: a semi-infinite medium with fixed boundary conditions, *Heat Mass Transfer*, 52 (2016),3,pp. 635-655.
- [34] Sadoun, N., Si-Ahmed, E.K., Colinet, P., On the refined integral method for one-phase Stefan problem with time-dependent boundary conditions, *Appl. Math. Model.*, 30 (2006),6, 531-544.
- [35] Mainardi, F., The Fundamental Solutions for the Fractional Diffusion-Wave Equation, *Appl. Math.Lett.*, 9 (1996),6, 23-28 .
- [36] Hristov, J., The heat-balance integral method by a parabolic profile with unspecified exponent: Analysis and benchmark exercises, *Thermal Science*, 13 (2009),2, pp.22-48.
- [37] Myers, T.G., Optimizing the exponent in the heat balance and refined integral methods, *Int. Comm. Heat Mass Transfer*, 44(2008),28, pp. 143-147.
- [38] Myers, T.G., Optimal exponent heat balance and refined integral methods applied to Stefan

- Problem, *Int. J. Heat Mass Transfer* 53 (2010), 5-6, pp.1119-1127.
- [39] Podlubny, I., *Fractional Differential Equations* (Academic Press, San Diego-Boston-New York – London-Tokyo-Toronto) (1999).
- [40] Langford, D., The heat balance integral method, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 16 (1973), 12, pp. 2424-2428.
- [41] Zener, C., Theory of growth of spherical precipitates from solid solutions, *J. Appl. Phys.*, 20 (1949), 10, pp. 950-953.
- [42] Mitchell, S. L., Myers, T. G., Application of standard and refined heat balance integral methods to one-dimensional Stefan problems. *SIAM Review* 52 (2010), 1, pp. 57–86.
- [43] Abramowitz, M., Stegun, I.A., *Handbook of Mathematical Functions With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, NBS Applied Mathematics Series 55, Washington, DC: National Bureau of Standards (1964).
- [44] Oldham, K.B., Spanier, J., *The fractional calculus*, New York: Academic press (1974).
- [45] Ortigueira, M.D., Machado, J.A.T., What is a fractional derivative?”, *Journal of Computational Physics.*, 293(2014), pp. 4-13.
- [46] Samko, S., Kilbas, A., Marichev, O., *Fractional Integrals and derivatives: Theory and Applications*, (Gordon and Breach Science Publishers, Amsterdam) (1993).
- [47] Hamill, T.D, Bankoff, S.G., Maximum and minimum bounds on the freezing-melting rates with time-dependent boundary conditions, *AIChE J* 9 (1963), 6, 741-744.
- [48] Hamill, T.D, Bankoff, S.G., Similarity solutions of the plane melting problem with temperature-dependent thermal properties. *Ind Eng Chem Fund* 3 (1964), 1, pp. 177-179.
- [49] Erdelyi, A., Magnus, W., Oberhettinger, F., Tricomi, F. *Higher Transcendental Functions*, vol. 3, chap. 18 (McGraw-Hill, New York) (1955).
- [50] Gorenflo, R., Loutschko, J., Luchko, Y., Computation of the Mittag-Leffler function and its derivatives. *Fractional Calculus & Applied Analysis* 5 (2002), 4, pp. 491–518.
- [51] Sharma, M., Jain, R., A note on a generalized m-series as a special function of fractional calculus. *Fractional Calculus & Applied Analysis* 12 (2009), 4, pp. 449-452.
- [52] Peng, J., Li, K., A note on property of the Mittag-Leffler function. *J. Math. Anal. Appl.* 370 (2010), 2, pp. 635–638

ГЛАВА 2.3

НЕЛИНЕЕН СУБДИФУЗИОНЕН МОДЕЛ¹

Метод с двойно интегриране, приближени решения и свързани проблеми

Получено е приближено аналитично решение на нелинейно субдифузионно уравнение чрез използване на подобрен интегрален метод с двойно интегриране. Дробно диференциално, по време, субдифузионно уравнение с гранично условие на Дирихле и степенна зависимост на дифузионния коефициент от концентрацията (температурата) е използвано като основен пример.

Разгледани са проблемите свързани с апроксимацията на дробната по време производна на Riemann-Liouville, когато разпределението се представя чрез параболичен профил с недефинирана експонента, и свързаните с това проблеми на точността на апроксимация. Крайното решение е в затворена аналитична форма като функция на автомоделна променлива от дробен порядък или алтернативно, чрез ефективна автомоделна променлива включващи ефектите на нелинейност идващи от зависимостта на дифузионния от концентрацията. Разгледани са проблемите свързани с оптимизация на експонентата на апроксимиращия профил, която зависи от степенна на дробен порядък и нелинейността на дифузионния коефициент. Ясно е показано, че апроксимиращото решение може да има вдлъбнат профил, характерен за субдифузионни релаксационни процеси, когато нелинейността на дифузионния коефициент е малка и дробният порядък е висок. В обратния случай, при силна нелинейност на дифузионния коефициент решенията са изпъкнали профили, характерни за дегенериращите дифузионни модели.

1. ВЪВЕДЕНИЕ

Аномалната дифузия в реални физични системи като среди с фрактална геометрия [1], дебели биологични мембрани [2], транспортиране на лекарствени препарати през кожата и полимери [3], силно разклонени порести структури [4, 5,6] и комплексни системи,

дискутирани в [7,8,9,10] (и коментирани там литературни източници), се моделира преди всичко чрез субдифузионни модели. Широко използваните подходи за решаване на тези модели са чисто математически по своя характер [11,12,13,14,15,16,17,18,19], но всъщност са приближени методи. Методът на интегралния баланс е сред приближените методи позволяващ да се получи решение в затворена форма (closed-form solution) [20, 21, 22] и е основния инструмент в изследването представено в тази глава.

Настоящата глава разглежда приближено аналитично решение на субдифузионен модел с нелинеен дифузионен коефициент

$$\frac{\partial^\mu u(x,t)}{\partial t^\mu} = \frac{\partial}{\partial x} \left(f(u) \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} \right) \quad (1)$$

Това уравнение е анализирано в много случаи, когато коефициентите на дифузия са представени като степенна $f(u) = D_{\mu 0} u^m$ или експоненциална зависимост $f(u) = D_{\mu 0} e^{mu(x,t)}$; $D_{\mu 0}$ е дробен (по време) дифузионен коефициент $[D_{\mu 0}] = [m^2 / \text{sec}^\mu]$ съответстващ на линейният модел когато $m = 0$ и решен в [23] (Глава 2.2).

С коефициент изразен чрез степенна зависимост $D_\mu = D_{\mu 0} u^m$ и $m > 0$, уравнение (1) моделира процеси на бавна дифузия (*slow-diffusion*), докато при $m < 0$ имаме процеси на бърза дифузия (*fast diffusion*). В случая на модел от цял порядък ($\mu = 1$) този проблем ($m > 0$) е достатъчно добре изследван [24,25,26,27]. Моделът (1) с $\mu = 1$ и $f(u) = D_{\mu 0} u^m$, като пример, за разлика от линейното дифузионното уравнение ($m = 0$), е чисто параболично уравнение във всички области, където $u \neq 0$, но

¹ Публикувано като: **Hristov J., Integral-balance solution to nonlinear subdiffusion equation, Chapter 3, in Frontiers in Fractional Calculus, 2017 , S. Bhalekar, Ed. Bentham, 2017, vol.1, pp.71-106.**

дегенерира в близост до всяка точка, където $u = 0$ [24]. Основната характеристика на това дегенеративно поведение е, че всяко смущение се разпространява с крайна скорост, като се формира фронт на разпространение на решението, който разделя смутената ($u \neq 0$) от несмутената ($u = 0$) част на средата [25, 26, 27].

Моделът (1) е изследван за случаите на бърза дифузия (*fast diffusion*) с $m = -1$ [28] и $0 < m < 1$ [16,32], докато решенията за големи времена, както за глобалното и не-глобалното поведение на решението са изследвани в [29]. Освен това, приближени аналитични решения [16,30,31,32] са изследвани, както за $m < 0$ така и за $m > 0$ (с дробни производни на Caputo). В допълнение, за случая на бавна дифузия ($m > 0$) Sun et al. [33] са използвали решение чрез не-Болцманова автомоделна променлива за скейлинг на основното уравнение и последващо числено решение. От своя страна, Plociczak and Okrasinska [34] са развили аналитично решение на модела (1) чрез автомоделна променлива.

Настоящата глава представя приближено решение на модела (1) в затворена аналитична форма, получено чрез метода на интегралния баланс, с използване на техниката на двойно интегриране (вече прилагана за решение на линейната задача [23]). Най-простата форма на интегралния метод (Heat-balance Integral Method1 HBIM) [35] е успешно прилаган за получаване на приближени решения на субдифузионни модели [20, 21, 22, 36] и други комплексни модели с [37,38,39,40,41]. Съществуват само няколко изследвания [32,34] и приближени решения в незатворена форма (not in closed forms). Ефективността на метода с двойно интегриране е

показана чрез решение на задачата на Дирихле за модела (1) със степенна зависимост на дифузионния коефициент $D_\mu = D_{\mu 0} u^m$.

Методът, използван тук, амалгама от подходите за решаване на два основни случая: решение за $m = 0$ и $0 < \mu < 1$ [23] и решение за $\mu = 1$ при $m > 0$ [42,43].

2. ФОРМУЛИРАНЕ НА ПРОБЛЕМА

Нека разгледаме субдифузия на температура (концентрация) $u(x, t)$ в полу-безкрайна среда моделирана чрез едномерно дробно диференциално уравнение

$$\frac{\partial^\mu u(x, t)}{\partial t^\mu} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{\mu 0} u^m \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right) \quad (2a)$$

с гранични и начални условия

$$\begin{aligned} u(0, t) &= u_s(t), \quad t \geq 0; & u(x, 0) &= u_\infty = 0, \\ x > 0; & \frac{\partial u(x, 0)}{\partial t} = 0, & x > 0 \end{aligned} \quad (2b, c, d)$$

В модела (2) дробната производна от $u(x, t)$ може да бъде лява производна на Riemann-Liouville [15]

$$\partial^\mu u / \partial t^\mu = {}_{RL} D_t^\mu u(x, t) = \frac{1}{\Gamma(1-\mu)} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{u(x, \tau)}{(t-\tau)^\mu} d\tau \quad (3a)$$

или лява производна на Caputo

$$\partial^\mu u / \partial t^\mu = {}_C D_t^\mu u(x, t) = \frac{1}{\Gamma(1-\mu)} \int_0^t \frac{1}{(t-\tau)^\mu} \frac{du(x, \tau)}{d\tau} d\tau \quad (3b)$$

Методът на интегралния баланс използва концепцията за крайна дълбочина на проникване δ (рязък фронт) на дифузанта, който еволюира във времето и налагаща следните гранични условия (гранични условия на Гудман) на приближеното решение $u_a(x, t)$ [35]

$$u_a(x, \delta) = 0, \quad x > \delta; \quad \frac{\partial u_a(\delta, t)}{\partial x} = 0;$$

$$\delta(t) = 0, \quad t = 0 \quad (4a,b,c)$$

В контекста на моделиране на субдифузионен процес, използването на принципа на крайна дълбочина на дифузионния слой е мотивирано от експериментални факти за наличието на почти рязък фронт на проникване на дифузиращата субстанция [2,3]. В съответствие с принципа на метода на интегралния баланс, при еднократно интегриране (НВИМ) [20,21,22] имаме

$$\int_0^{\delta} \frac{\partial^{\mu} u}{\partial t^{\mu}} dx = -D_0 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{x=0} \quad (5)$$

Замествайки $u(x, t)$ чрез апроксимиращ профил $u_a(x, t)$ води до обикновено диференциално уравнение относно $\delta(t)$. Интегралното съотношение (5) на класическият НВИМ може да се прилага към дробни субдифузионни уравнения [20,21,22]. Интегралът в лявата страна на (5) се нарича *дробен по време топлинен интегрален баланс* (fractional-time Heat-balance Integral, **FT-НВИ**) [20,22] независимо от факта, че *градиентът при $x=0$ трябва да се определи чрез избрания апроксимиращ профил*. Сега, ние ще покажем как техниката на двойно интегриране (DIM), вече успешно използвана за решаване на нелинейни задачи [42,43,44], може да се приложи към нелинейно субдифузионно уравнение: *подход, който е прилаган до този момент само за случая с $m=0$* [23]

3. ИНТЕГРАЛЕН МЕТОД ЗА НЕЛИНЕЙНО ДИФУЗИОННО УРАВНЕНИЕ

3.1. Предварителна трансформация на дифузионния член

Успешното прилагане на интегралния метод изисква предварителна трансформация на дифузионния член в дясната страна на (2), а именно [42,43].

$$D_{\mu 0} u^m \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{D_{\mu 0}}{m+1} \frac{\partial u^{m+1}}{\partial x} \quad (6)$$

Следователно, моделът (2) може да се представи като

$$\frac{\partial^{\mu} u(x, t)}{\partial t^{\mu}} = \frac{D_{\mu 0}}{m+1} \frac{\partial u^{m+1}}{\partial x^2} \quad (7)$$

3.1.1. Метод с еднократно интегриране (НВИМ)

Решението чрез НВИМ изисква еднократно интегриране на (2) от 0 до δ , а именно [35]

$$\int_0^{\delta} \frac{\partial^{\mu} u}{\partial t^{\mu}} dx = -\frac{D_{\mu 0}}{m+1} \left(\frac{\partial u^{m+1}}{\partial x} \right)_{x=0} \quad (8)$$

Уравнение (8) е основното интегрално съотношение на НВИМ.

3.2. Метод с двойно интегриране (DIM)

Техниката на DIM [23,42,43] разглежда две последователни интегрирания на дифузионното уравнение: i) *Първата стъпка на DIM* е интегриране от 0 до x , и ii) *втората стъпка на DIM* е интегриране от 0 до δ . Прилагането на тази техника към (1) води до [23]

$$\int_0^{\delta} \int_x \frac{\partial^{\mu} u(x, t)}{\partial t^{\mu}} dx dx = \frac{D_{\mu 0}}{m+1} u^{m+1}(0, t) \quad (9)$$

Уравнение (9) е основното интегрално съотношение на метода с двойно интегриране, когато диференциалното уравнение е от дробен порядък. Това интегрално съотношение е приложимо и за случая на $\mu=1$. Лявата страна на (13) се нарича *дробен по време топлинен двоен*

балансов интеграл (fractional-time Double-balance IntegralpFT-DBI) [23].

4. РЕШЕНИЕ ЧРЕЗ DIM

Апроксимиращият профил u_a , използван в решенията, е параболичен с недефинирана експонента [36,37,39,40,41,43,44,45]

$$u_a = u_s \left(1 - \frac{x}{\delta}\right)^n \quad (10)$$

Профилът (10) изпълнява граничните условия на фронта δ за всяка стойност на експонентата n [40,42], а именно $u_a(\delta, t) = \partial u_a(\delta, t)/\partial x = 0$. С цел яснота на изложението, позволяваща да се демонстрира DIM чрез класически пример, ние разглеждаме случая на $u(0, t) = 1$, който е еквивалентен на решение на задачата с безизмерен профил $u_a/u_s = \bar{u} = (1 - x/\delta)^n$. Освен това, ние разглеждаме нулеви начални условия $u_\infty = u(x, 0) = 0$, които позволяват успешно да се използват както производни на Riemann-Liouville така и производни на Caputo.

4.1. Апроксимация на дробен по време топлинен двоен баланс интеграл (FT-DBI)

4.1.1. FT-DBI с производна на Riemann-Liouville

Заместването в у-ние (9) на u чрез u_a води до [23,40]:

$$\begin{aligned} \int_0^\delta \left[\int_x^\delta {}_{RL}D_t^\mu u_a(x, t) dx \right] dx &= \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-\mu)} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{1}{(\tau-t)^\mu} \frac{\delta^2}{(n+1)(n+2)} d\tau = \quad (11) \\ &= N_{RL} D_t^\mu \delta^2 \end{aligned}$$

където $N_{RL} = [(n+1)(n+2)]^{-1}$

4.1.2. FT-DBI с производна на Caputo

Уравнение (9), с производна на Caputo и апроксимиращия профил (10), води до

$$\begin{aligned} \int_0^\delta \left[\int_x^\delta {}_CD_t^\mu u_a(x, t) dx \right] dx &= \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-\mu)} \int_0^t \frac{1}{(t-\tau)^\mu} \left[\frac{2}{(n+1)(n+2)} \delta \frac{d\delta}{d\tau} d\tau \right] = \quad (12) \\ &= N_C D_t^\mu \delta^2 \end{aligned}$$

където $N_C = N_{RL} = [(n+1)(n+2)]^{-1}$

4.2. Дълбочина на проникване

4.2.1. Решение чрез DIM

Прилагайки основното уравнение (9) заедно с резултатите (11) и (12) получаваме две дробни диференциални уравнения относно дълбочината на проникване

$${}_{RL}D_t^\mu \delta^2 = D_{\mu 0} \frac{(n+1)(n+2)}{m+1} \quad (13)$$

$${}_CD_t^\mu \delta^2 = D_{\mu 0} \frac{(n+1)(n+2)}{m+1} \quad (14)$$

Физически началното условие е $\delta(t=0) = 0$.

Тогава, $\lim_{t \rightarrow 0} [{}_{RL}D_t^{\mu-k-1} \delta^2(t)] = \delta_{t=0} = 0$.

Десните страни (13) и (14) са константи. Дробното интегриране на уравнението с производна на Riemann-Liouville [лит.44-стр.139] води до

$${}_{RL}\delta(t) = \sqrt{D_{\mu 0} t^\mu} \sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{\Gamma(1+\mu)(m+1)}} \quad (15)$$

За $\mu = 1$ и $m = 0$, като пример, получаваме зависимостта от цял порядък получено чрез DIM [42,45,46].

С производна на Caputo получаваме [44]

$${}_C\delta(t) = \sqrt{D_{\mu 0} t^\mu} \sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{\Gamma(1+\mu)(m+1)}} \quad (16)$$

Следователно, уравненията за дълбочината на проникване са еднакви, което е един очакван резултат, понеже ${}_{RL}D_t^\mu \delta^2 = {}_CD_t^\mu \delta^2$, когато началното условие е $\delta(t=0) = 0$ [44].

4.2.2. Дълбочина на проникване: решение чрез НВІМ

С цел яснота на изложението, при използване на НВІМ имаме

$$\frac{D_{\mu 0}}{m+1} \left(\frac{\partial u_a^{m+1}}{\partial x} \right)_{x=0} = -D_{\mu 0} \frac{n}{\delta} \quad (17)$$

Тогава, прилагайки уравнение (8) получаваме:

- С производна на Riemann-Liouville

$${}_{RL}D_t^\mu \frac{\delta}{n+1} = \frac{n}{\delta} \Rightarrow \delta {}_{RL}D_t^\mu \delta = n(n+1) \quad (18)$$

Използвайки трансформацията на Лаплас към (18) получаваме

$${}_{RL}\delta(t)_{NBIM} = \sqrt{D_{\mu} n(n+1)} \frac{t^{\mu/2}}{\sqrt{\Gamma(1+\mu)}} \quad (19)$$

Следователно, с използване на НВІМ ние губим ефекта на нелинейност представен чрез параметъра m . Този ефект при използване на НВІМ вече беше отбелязан в [42].

- С производна на Caputo

По аналогичен път, ние имаме

$${}_CD_t^\mu \delta(t)_{NBIM} = \sqrt{D_{\mu 0} n(n+1)} \frac{t^{\mu/2}}{\sqrt{\Gamma(1+\mu)}} \quad (20)$$

Следователно, пак се губи ефекта на параметъра m . Казано общо, решението чрез НВІМ не може да отчете влиянието на параметъра на нелинейност чрез експонентата m , за разлика от решението чрез DIM (също така и при моделите от цял порядък [42]).

4.2.4. Приравняване на дълбочините на проникване получени чрез DIM и НВІМ

Сега, ние се връщаме отново към дълбочините на проникване определени чрез НВІМ и DIM. От физична гледна точка, дълбочините на проникване трябва да се равни, т.е. $\delta_{\mu(NBIM)} = \delta_{\mu(DIM)}$, независимо от използваната техника на интегриране. Тогава, получаваме равенството

$$\sqrt{D_{\mu} t^{\mu}} \sqrt{\frac{n(n+1)}{\Gamma(1+\mu)}} = \sqrt{D_{\mu} t^{\mu}} \sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{\Gamma(1+\mu)(m+1)}} \quad (21)$$

Директното решение на (21) е $n = 2/m$ и следователно експонентата на приближения параболичен профил е реципрочна на нелинейния параметър m . За $m > 1$ (бавна дифузия) следва, че $n < 1$, докато при $0 < m < 1$ имаме $n > 1$. Освен това, тази проста зависимост не включва задачата на линейна дифузия за $m = 0$. Независимо от това, стойностите на n , получени чрез приравняване на дълбочините на проникване, ще бъдат разглеждани като граница (виж коментарите в следващата точка) за експонентите свързани с фиксирани стойности на μ и m , когато се разглежда оптимизацията на приближеното решение.

5. ПРИБЛИЖЕНО РЕШЕНИЕ, АВТОМОДЕЛНА ПРОМЕНЛИВА И СВЪРЗАНИ ПРОБЛЕМИ

Сега ние продължаваме с решението получено чрез DIM и следвайки резултатите относно $\delta_{\mu}(t)$ приближеното решение на (2) е

$$u_a(x, t) = \left(1 - \frac{x}{\sqrt{D_{\mu 0} t^{\mu}} \sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{(m+1)\Gamma(1+\mu)}}} \right)^n \quad (22)$$

Параболичният профил (22) е функция на безизмерното отношение $\xi = x/\delta$. С получаване на изразите за $\delta(t)$, отношението x/δ дефинира нова автомоделна променлива $\eta_\mu = x/\sqrt{D_{\mu 0} t^\mu}$. За $\mu = 1$ получаваме директно класическата Болцманова променлива $\eta_{\mu=1} = x/\sqrt{D_0 t}$.

От друга страна, обаче, параболичният профил (22) дефинира също и ефективна автомоделна променлива (*effective similarity variable*) $\eta_{eff(\mu,m)} = x/\sqrt{D_{eff(\mu,m)} t^\mu}$, където ефективния коефициент на дифузия е $D_{eff(\mu,m)} = D_{\mu 0} / [(m+1)\Gamma(1+\mu)]$. Следователно, ние можем да представим ефективния коефициент на дифузия като $D_{eff(\mu,m)} = D_{\mu 0} P_{(\mu,m)}$ със забавящ множител (a retardation factor) $P_{(\mu,m)} = 1/[(m+1)\Gamma(1+\mu)] < 1$, $0 < P_{(\mu,m)} < 1$, който инкорпорира ефектите на субдифузия и нелинейност на дифузионния коефициент; ефектът на параметъра m е по-силен отчитайки факта, че $\Gamma(1+\mu)$ за $0 < \mu < 1$ има порядък 1.

В термини на ефективен дифузионен коефициент и ефективна автомоделна променлива приближеното решение се представя като

$$u_a(x,t) = \left(1 - \frac{x}{\sqrt{D_{eff(\mu,m)} t^\mu} \sqrt{(n+1)(n+2)}} \right)^n = \left(1 - \frac{\eta_{eff(\mu,m)}}{\sqrt{(n+1)(n+2)}} \right)^n \quad (23a,b)$$

Изразите (23a,b) наподобяват класическо решение на моделите с цял порядък [43,47], когато $\mu = 1$, но единствената разлика е в дефиницията на ефективната автомоделна променлива $\eta_{eff(\mu,k)}$, включваща задържащия

ефект на дробния порядък μ и бавната дифузия представена чрез параметъра m .

Основният проблем възникващ при използване на интегралния метод с апроксимиращия профил (10) идва от факта, че граничните условия на Гудман (4a, b, c) се изпълняват за всяка стойност на експонентата n . По-точно, профилът (10) може да се представи в по-обща форма като $u_a = a + b(1 - cx)^n$ с 4 параметъра, които трябва да се определят чрез граничните условия parameter. На практика, условията на Гудман (4a,b,c) са само 3, докато на нас са ни необходими 4 условия за определяне на всички параметри на профила. Този проблем е анализиран подробно в [47]. Следователно, за определяне на n са необходими допълнителни ограничения, които да водят до решения с минимална грешка на апроксимация.

Основният вътрешно присъщ проблем е, че приближеният профил е решение на интегралното съотношение, а не на изходното дифузионно уравнение. Подходът за определяне на n чрез приравняване $\delta_{\mu(HVIM)}$ и $\delta_{\mu(DIM)}$ е също физически обоснован и не е свързан с условието приближения профил да е решение на изходния дифузионен модел. Определянето на функцията на грешката и оптималните експоненти на профила се разглеждат в следващата секция на тази глава.

5.1. Оценка на грешката на приближеното решение (Error measure)

Ние можем да определим експонентата n чрез минимизация на остатъчната функция, когато приближения профил (10) трябва да изпълнява ролята на решение на изходния модел

(2). Този момент е от особена важност, защото методът на интегралния баланс [35,47] е нулев моментен метод (a zero-moment method) [51]. В този случай, ние можем да дефинираме остатъчната функция (the residual function)

$$R(x, t) = \frac{\partial^\mu u_a}{\partial t^\mu} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{\mu 0} u_a^m \frac{\partial u_a}{\partial x} \right) \quad (24)$$

Остатъчната функция $R(x, t)$ трябва да достига до определен минимум за определена стойност на експонентата n .

Ние ще трансформираме областта с подвижна граница $0 \leq x \leq \delta(t)$ в област с фиксирани граници $0 < \xi < 1$ чрез въвеждане на променливата (координати на Зенер) $\xi = x/\delta$ [52]. Тогава, апроксимиращият профил е

$$u_a = (1 - x/\delta)^n \Rightarrow V(\xi, t) = (1 - \xi)^n \quad (25)$$

В пространството на променливата ξ процедурата на минимизация се фокусира върху минимума на средноквадратичната грешка $E_M = \int_0^1 [R(\xi, t)]^2 d\xi$.

Следователно, в пространство ξ имаме

$$\frac{\partial^\mu u_a}{\partial t^\mu} \rightarrow \frac{\partial^\mu V(\xi, t)}{\partial t^\mu} = \frac{\partial^\mu}{\partial t^\mu} (1 - \xi)^n \quad (26)$$

и апроксимиращата техника е обяснена в следващата точка

5.2. Апроксимиране на дробната производна

Техниката на апроксимация беше развита в [23] (Глава 2.2) чрез представяне на профила $V(\xi) = (1 - \xi)^n$ като сходящ степенен ред

$$V_a(\xi) \approx \sum_{k=0}^N b_k \xi^k, \quad 0 \leq \xi \leq 1 \quad (27)$$

Тогава, след дробно диференциране, ние отново можем да представим (27) във форма, където

всеки член да съдържа степен на ξ , и да го представим като произведение на член зависещ от ξ и $t^{-\mu}$, а по-точно [23] (Глава 2.2):

$${}_{RL}D_t^\mu V_a(\xi) \approx \Phi(n, \xi, \mu) t^{-\mu},$$

$$\Phi(n, \xi, \mu) = \sum_{k=0}^n c_k t^{-\mu} \quad (28)$$

Следователно, остатъчната функция може да се апроксимира като

$$R_{RL}(\xi, t) =$$

$$= \left[{}_{RL}D_t^\mu \sum_{k=0}^N b_k \xi^k - D_{\mu 0} \left(\frac{m}{\delta^2} \right) V^{m-1} \left(\frac{\partial V}{\partial \xi} \right)^2 \right] \quad (29)$$

С производна на Caputo, развитието в ред е $V_a(\xi) \approx \sum_{k=0}^N b_k \xi^k$ и избягвайки големи изрази можем да представим апроксимацията като [23] (Глава 2.2): ${}_CD_t^\mu V_a(\xi) \approx {}_C\Phi(n, \xi, \mu) t^{-\mu}$. Тогава, $[{}_{RL}\Phi(n, \xi, \mu) - {}_C\Phi(n, \xi, \mu)] = 1/\Gamma(1 - \mu)$ не зависи от n . Остатъчната функция $R_C(\xi, t)$ в този случай има същата конструкция като тази представена чрез (29) [23] (Глава 2.2).

5.3. Поведение на експонентата n на границите на дифузионния слой

В началото на този анализ, ние трябва да определим какво е поведението на остатъчната функция на границите на дифузионния слой: $x = 0$ и $x = \delta$. Тогава, като пример, за $x = 0$ и с δ от решението чрез DIM имаме

$$R_{RL}(0, t) = \frac{r_{RL}(0, t)}{t^\mu} \quad (30)$$

$$r_{RL}(0, t) = \left[\frac{1}{\Gamma(1 - \mu)} - m(m+1)\Gamma(1 + \mu) \frac{n^2}{(n+1)(n+2)} \right] \quad (31)$$

k	0	0.5	2/3	1	1.5	2	3	4	5
μ									
0.1	37.480	3.392	2.692	1.830	1.242	0.940	0.632	0.476	0.382
0.2	17.458	3.051	2.394	1.673	1.153	0.880	0.597	0.452	0.363
0.3	10.766	2.661	2.124	1.521	1.065	0.820	0.561	0.427	0.344
0.4	7.403	2.314	1.884	1.374	0.978	0.789	0.525	0.401	0.324
0.5	5.372	2.0	1.655	1.231	0.890	0.697	0.487	0.374	0.303
0.6	4.0	1.712	1.439	1.092	0.802	0.634	0.447	0.346	0.281
0.7	3.0	1.433	1.232	0.953	0.712	0.569	0.406	0.315	0.258
0.8	2.224	1.188	1.029	0.813	0.619	0.500	0.361	0.282	0.232
0.9	1.584	0.936	0.824	0.666	0.519	0.428	0.310	0.245	0.203

Таблица 1. Експоненти на приближените решения изпълняващи условията на дифузионното уравнение за $x = 0$

$$\Phi(n, 0, \mu) = c_k = b_k \left[\Gamma(1+k) / \Gamma(1+k-\mu) \right] \text{ и}$$

$k = 0$, защото всички членове на апроксимацията чрез ред ${}_{RL}D_t^\mu V_a(\xi) \approx \Phi(n, \xi, \mu) t^{-\mu}$ за $k \geq 1$ зависят от x (т.е., от ξ).

Решенията на независещата от времето остатъчна функция (31) (квадратно уравнение по отношение на n) спрямо n за различни стойности на μ и m са представени в Таблица 1. Графичното представяне на Фиг.2 ясно показва, че стойностите на n намаляват с нарастване, както на μ така и на m , и преди всичко поведението е $n < 1$. Важно е да се отбележи, че за $n < 1$

параболичният профил (10) генерира изпъкнали разпределения като приближени решения [42]. Определянето на експонентата n при $x = 0$ може да се разглежда като локално калибриране на параболичния профил.

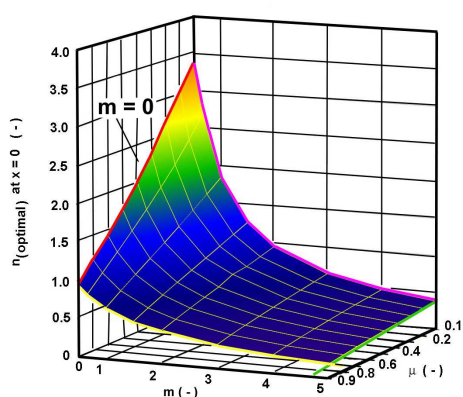
По-нататък, с цел да се изпълняват условията на Goodman на фронта на решението $u_a(\delta, t) = 0$ и $\partial u_a(\delta, t) / \partial x = 0$ ние разглеждаме граничен преход за $x \rightarrow \delta$ и следователно $\Phi(n, 1, \mu) \rightarrow 1$. Поведението на експонентата, обаче, трябва да се определи от поведението на втория член на (28), а именно

$$\lim_{x \rightarrow \delta} R(\delta, t) \equiv (1 - \xi)^{n(m-1)+2(n-1)} \quad (32)$$

Това условие изисква

$$n(m-1) + 2(n-1) > 0 \Rightarrow n > \frac{2}{m+1} \quad (33)$$

Условието (33) потвърждава резултатите получени в [42] където беше установено, че за $\mu = 1$ експонентите на параболичния профил следват правилото $n \approx 1/(m+1)$, за задачата на Дирихле. Когато $\mu = 1$ и $m = 0$ ние имаме добре познатото условие $n > 2$ [45,50]. Определянето на поведението на n за $\xi \rightarrow 1$ е практически същото като това наблюдавано при $\xi \rightarrow 0$, а по-точно n намалява с нарастване на m . Ефектът на



Фиг.1. Оптимална експонента $n_{(optimal)x=0}$ изпълняваща условията на моделното уравнение на границата $x = 0$, като функция на μ и k .

μ върху n е аналогичен, но експонентата е по-силно повлияна от m отколкото от μ .

5.4. Минимизация на глобалната грешка на апроксимация

Оценката на грешката, дефинирана като

$$E(n, \mu, m, t) = \int_0^{\delta} [R(x, t)]^2 dx \rightarrow \min, \text{ всъщност, е}$$

критерият на Langford [54] за оценка на интегрални решения на модели от цял порядък. [42, 43, 45, 50], вече приложена към субдифузионни уравнения с решения чрез НВІМ [21, 22] и DIM [23] (Глава 2.2). В пространството на променливата ξ , този подход означава, че

$$E(n, \mu, n, m, t) = \int_0^1 [R_{RL}(\xi, t)]^2 d\xi = \int_0^1 \left[\frac{r_{RL}(\xi, t)}{t^\mu} \right]^2 d\xi \quad (34)$$

Последната форма на (34) ясно показва, че $E(n, \mu, n, m, t)$ намалява с времето, т.е.

$$E \sim (1/\delta^2) = e(n, m, \mu)/\delta^2 \equiv 1/t^{2\mu} \quad (\text{виж същите случаи в [23, 42, 43]}), \text{ докато числителят}$$

$$e(n, m, \mu) = \int_0^1 [r_{RL}(\xi, t)]^2 d\xi \text{ не зависи от времето, а само от } n, m \text{ и } \mu.$$

При развитието на функционалната зависимост (34) се използва факта, че производението $\delta^2/t^\mu D_{\mu 0}$ не зависи от времето. Решението на (34), което е минимизация по отношение на n , за различни $0 < \mu < 1$ и $m > 0$, ни дава оптималните стойности на експонентата n_{opt} в Таблица 2. Числените стойности систематизирани в Таблица 2 показват две основни тенденции:

- Оптималната експонента намалява с нарастване на дробния порядък μ ,

когато параметъра на нелинейност m е фиксиран.

- Оптималната експонента намалява с нарастване на параметъра на нелинейност m , когато дробният порядък μ е фиксиран.

Същото поведение беше наблюдавано и при определянето на експонентата n при $x = \xi = 0$. Трябва да се отбележи, че максималните стойности на средноквадратичната грешка E не надхвърлят 10^{-5} в някои частни случаи, но в доминиращите случаи тя е от порядъка на 10^{-7} .

Това са физически адекватни резултати, защото както дробният порядък μ така и параметъра на нелинейността m са свързани със забавяне, по време, на развитието на фронта $\delta(t)$. По-точно, намаляването на μ отменя надясно разпределенията (с $\eta_\mu = x/\sqrt{D_{0\mu}t^\mu}$ като независима променлива) на дифузанта по отношение на нормалната дифузия ($\mu = 1, m = 0$), което е известен факт [21,22,23] и това поведение е показано на Фиг.2а. Когато дифузията протича при $\mu = 1$, но при $m > 0$ (класическа бавна дифузия), нарастването на стойността на m отменя разпределенията наляво (с $x/\sqrt{D_0t}$ като независима променлива) спрямо случая на $m = 0$; нарастването на стойността на m води до намаляване на дълбочината на дифузионния слой $\delta(t)$.

Още повече, профилите на разпределенията стават изпъкнали и “стръмни”, като пресичат абсцисата почти вертикално; факт известен от класическите решения чрез автомобилна променлива на дегенериращи уравнения [24,25,26], а както и от приближените решения [27,42], както е показано на Фиг.2b.

6. ЧИСЛЕНИ ЕКСПЕРИМЕНТИ И АНАЛИЗИ НА РЕЗУЛТАТИТЕ

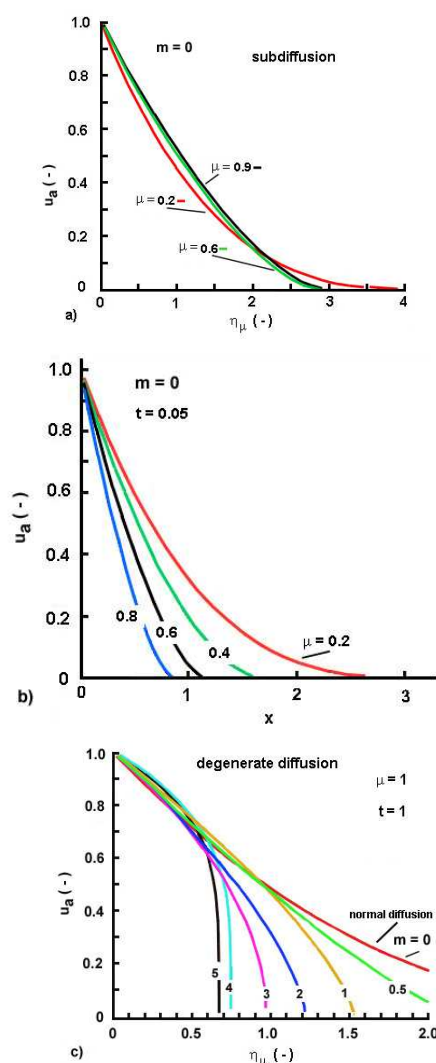
Числените експерименти представени в тази точка на главата визуализират получените аналитични резултати и позволяват оценка на резултатите в няколко основни направления:

- 1) Представяне на профилите като функция на автомоделната променлива $\eta_\mu = x/\sqrt{D_{0\mu}t^\mu}$
- 2) Дискриминационен анализ на поведението на получените решения (профили) в резултат на едновременното действие на субдифузията (чрез дробния порядък μ) и на дегенериращата дифузия (чрез параметъра m).
- 3) Представяне на профилите чрез ефективната променлива $\eta_{eff(\mu,m)} = x/\sqrt{D_{eff(\mu,m)}t^\mu}$
- 4) Представяне на получените решения в явен вид (в термини на физическата пространствена координата x и времето t) отчитайки реалните порядъци на коефициентите на дифузия в субдифузионни системи.

6.1. Решения (профили) представени чрез автомоделната променлива $\eta_\mu = x/\sqrt{D_{0\mu}t^\mu}$

Профилите представени като функции на автомоделната променлива η_μ демонстрират две различни поведения.

- Първо, за малки стойности на параметъра m , в диапазона $0 < m < 1$, приближените решения демонстрират *класическо субдифузионно поведение* със *слаб ефект на дегенерираща дифузия* (нелинейността в дифузионния коефициент). Графичното представяне на Фиг.3 ясно показва, че ефекта на дегенериращата дифузия и силен когато дробният порядък μ е близък до 1 (виж фиг.3b,c,d).
- С нарастване на стойността на m , когато ефектът на дегенериращата дифузия става по-явен, е лесно да се забележи *промяна в поведението на профилите от вдлъбнати към изпъкнали*.



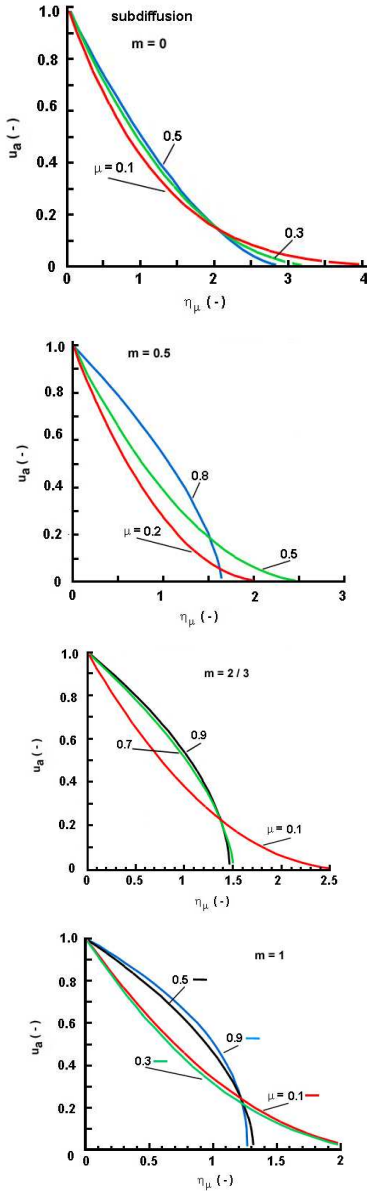
Фиг.2. Типични приближени решения получени чрез метода на интегралния баланс (двойно интегриране).

а) Типична субдифузия с постоянен дифузионен коефициент т.е. за $m = 0$.

б) Типична субдифузия с постоянен дифузионен коефициент т.е. за $m = 0$.

с) Представяне чрез пространствената координата като независима променлива за фиксиран момент от време $t = 0.05$

Типична дегенерираща дифузия (i.e. with $m > 0$) $\mu = 1$ and various m



Фиг.3. Приблизени решения получени чрез метода на двойно интегриране представени като функция на автомоделната променлива $\eta_\mu = x/\sqrt{D_{0\mu}t^\mu}$. Слаби ефекти на нелинейност от страна на коефициента на дифузия (малки стойности на m) и силно представяне на субдифузията.

- Типична силна субдифузия ($m=0$) за $\mu \leq 0.5$.
- Приблизени профили за $m=0.5$. Промените във формата на профила при промяна на дробния порядък μ лесно се виждат.
- Приблизени профили за $m=2/3$.
- Приблизени решения за $m=1$, където лесно може да се види как субдифузията доминира само при малки стойности на μ .

Независимо от поведението на решенията, (както изпъкнали така и вдлъбнати), наклонът на профилите намалява с нарастване на дробния порядък μ . Тези резултати потвърждават наблюденията на Das et al. [16], защото наклонът на профила $du_a/d\eta_\mu$ (като правило отрицателен)

6.2. Конкурентно поведение между субдифузия и дегенеративна дифузия

На основата на числените резултати получени и дискутирани до този момент е ясно, че критичната точка за смяна на формата на профила е при $n=1$. Ако $n<1$ получаваме изпъкнал профил, обратно при $n>1$ профилът е вдлъбнат. Това са директни резултати от числените симулации, но ние можем да ги свържем със средноквадратичното преместване

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^\delta u_a x^2 dx.$$

С параболичния профил

u_a представен чрез (10) имаме

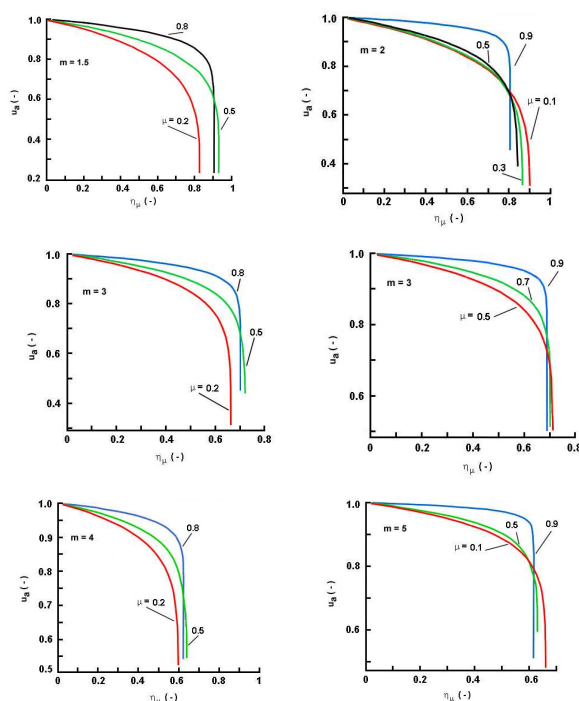
$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \frac{\delta^2}{(n+1)(n+2)} = \\ &= (D_{0\mu} t^\mu) 2(m+1)\Gamma(1+\mu) = \\ &= 2(D_{0\mu} t^\mu) \left(1/p_{(\mu,m)}\right)^2 \end{aligned} \quad (35)$$

Субдифузионното поведение остава, но наклонът на зависимостите $\langle x^2 \rangle \sim t^\mu$ зависи от множителя

$$\left(1/p_{(\mu,m)}\right)^2 = 2(m+1)\Gamma(1+\mu).$$

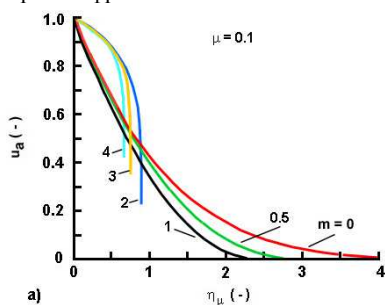
$$m=1 \text{ получаваме } \left(1/p_{(\mu,m)}\right)^2 = 4\Gamma(1+\mu).$$

Резултатите са представени на Фиг 4 и Фиг. 5.

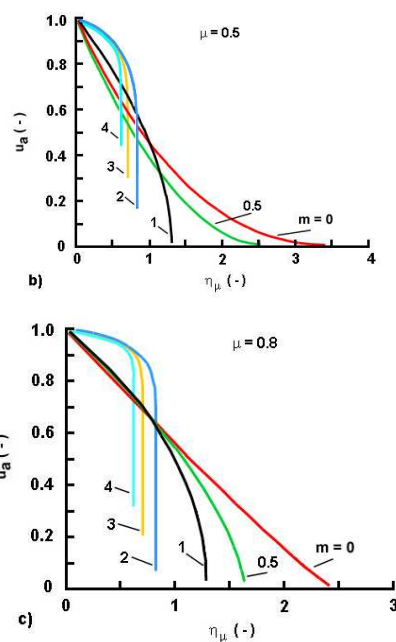


Фиг.4. Приблизени профили получени чрез DIM представени като функция на променливата $\eta_\mu = x/\sqrt{D_{0\mu}t^\mu}$. Силни ефекти на нелинейността на дифузионния коефициент ($m > 1$) и слабо субдифузионно влияние.

- Приблизени решения за $m = 1.5$.
- Приблизени решения за $m = 2$.
- Приблизени решения за $m = 3$. Случаи $\mu \leq 0.5$ и $\mu = 0.8$
- Приблизени решения за $m = 3$. Случаи с $\mu > 0.5$ (слаби ефекти на субдифузията). Фронталните части на профилите са стръмни като тези показани на фиг.3с.
- Приблизени решения за $m = 4$. Силният ефект на m подтиска всички ефекти на субдифузията за $0 < \mu < 1$.
- Приблизени решения за $m = 5$. Ефектът на m е силен и води до изпъкнали профили със стръмни фронтове



a)



Фиг.5. Приблизени профили като функция на променливата $\eta_\mu = x/\sqrt{D_{0\mu}t^\mu}$ демонстриращи ефекта на нелинейността на дифузионния коефициент (чрез m) в 3 различни точки на субдифузионния диапазон.

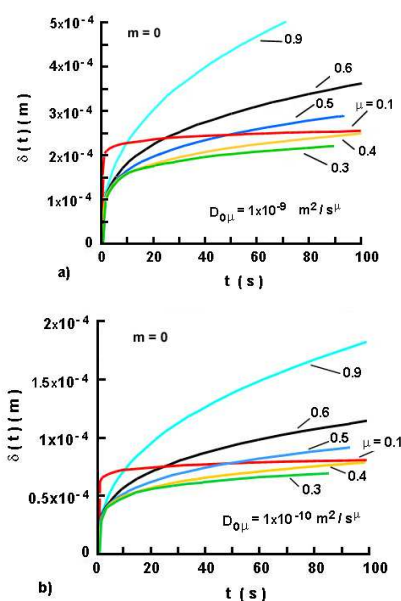
- Решение за $\mu = 0.1$ и различни m .
- Решение за $\mu = 0.5$ и различни m .
- Решение за $\mu = 0.8$ и различни m .

6.4. Директно представяне на профилите чрез x и t

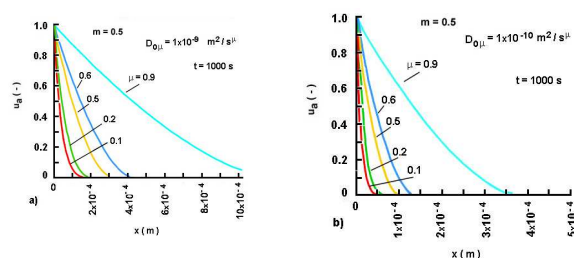
Директното представяне на приближените решения в термини на пространствената координата x и времето t е *практически стил* при моделните методи като декомпозиционния метод на Адомиан [16, 30], вариационния итерационен метод [16], хомотопия с малък параметър [31], и т.н. В контекста на разглеждания тук проблем, за разлика от случаите където се използват автомоделни променливи [34] (методът на интегралния баланс е използван в това изследване) съществуващите приближени решения на Das [16, 18, 32] са получени под формата на редове съдържащи в явен вид степени

на x и t . Още повече, има много специфичен момент в тези решения [16, 32, 32], а именно: дифузионният коефициент $D_{\mu 0}$ е приет равен на 1. За простота на изчисленият, това е често срещан математически подход, но от друга страна силно противоречащ на физиката на моделираните процеси. По-точно, за дифузия моделирана чрез закона на Фик коефициентът на дифузия е от порядъка $O(10^{-5}) - O(10^{-6})$, докато при субдифузионните процеси [55-58] той е от порядъка $O(10^{-9}) - O(10^{-10})$. Когато коефициентът на дифузия $D_{\mu 0}$ се инкорпорира в автомоделната променлива η_{μ} то неговият порядък не влияе върху решението, както беше демонстрирано в [23] (Глава 2.2). Освен това, порядъка на $D_{\mu 0}$ не влияе върху определяне на оптималната експонента на приближеното решение (виж [23] (Глава 2.2) и проведената там оптимизационна процедура).

Графичните представяния на Фиг.6а,b показват как дълбочината на проникване $\delta(t)$, еволюира във времето и ефекта върху нея на порядъка на коефициента на дифузия $D_{0\mu}$, даже и в най-простия случай когато $m = 0$. Тъй като $\delta(t) \sim \sqrt{D_{0\mu}}$, промяната на порядъка на $D_{0\mu}$ от 10^{-9} към 10^{-10} води до коефициент на задържане (a retardation factor) от порядъка на 0.316, само от страна на коефициента на дифузия.



Фиг.6. Дълбочини на проникване $\delta(t)$ като функции на времето при различни стойности на дифузионния коефициент $D_{0\mu}$ а) Ситуация при $D_{0\mu} = 1 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}^{\mu}$. б) Ситуация при $D_{0\mu} = 1 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}^{\mu}$.

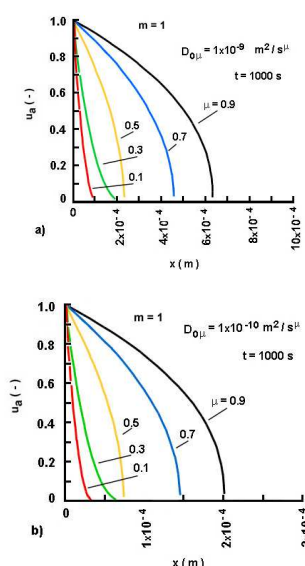


Фиг.7. Приблизени решения като функция на пространствената координата x за фиксиран момент от време $t = 1000 \text{ s}$. Слаба нелинейност на дифузионния коефициент. Ефект на порядъка на дифузионния коефициент. $D_{0\mu}$ а) Случай при $D_{0\mu} = 1 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}^{\mu}$. б) Случай при $D_{0\mu} = 1 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}^{\mu}$.

Ако, обаче, ние търсим профили като функция на пространствената координата за фиксиран момент от време, тогава графиките на Фиг. 7а,b ясно показват комбинирания ефект на дробния порядък μ и на разликата в порядъците на дифузионните коефициенти, в случай на слаба нелинейност ($m = 0.5$). Характерът на тези

профили е същият аналогичен на решенията представени като функция на автомоделната променлива η_μ .

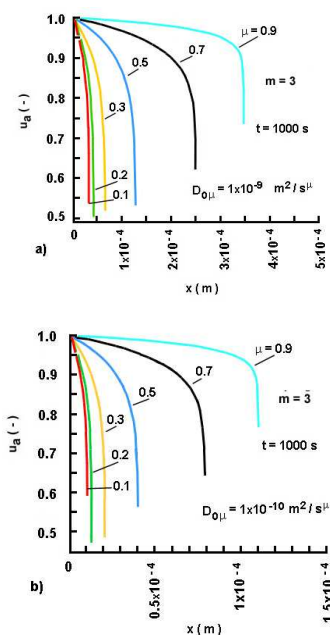
Случаят за $m=1$, когато се извършва смяна на поведението на профила, чрез вариране на дробния порядък μ , е показан на Фиг. 8a,b. Още повече, силната нелинейност на дифузионния коефициент за $m=3$ и ефектът на влиянието на порядъка на дифузионния коефициент са показани на Фиг. 9a,b.



Фиг.8. Приблизени решения като функция на x за фиксиран момент от време $t=1000s$. Умерена нелинейност на дифузионния коефициент ($m=1$). Ефект на порядъка на дифузионния коефициент $D_{0\mu}$. а) Случай при $D_{0\mu}=1 \times 10^{-9} m^2/s^\mu$. б) Случай при $D_{0\mu}=1 \times 10^{-10} m^2/s^\mu$.

ИЗВОДИ

Тази изследване представя един ефективен приближен метод използващ техниката на двойно интегриране за решаване на нелинеен дифузионен модел с дробни (по време) производни.



Фиг.9. Приблизени решения като функция на x за фиксиран момент от време $t=1000s$. Силна нелинейност на дифузионния коефициент ($m>1$). а) Случай при $D_{0\mu}=1 \times 10^{-9} m^2/s^\mu$. б) Случай при $D_{0\mu}=1 \times 10^{-10} m^2/s^\mu$.

Едно важно качество на концепцията за крайна дълбочина на проникване и използвания метод с двойно интегриране е възможността да се получат решения в затворена форма, които от своя страна позволяват допълнителен анализ, които, на практика са невъзможни при така наречените точни решения представен чрез безкрайни редове.

Полученото решение позволява ясно да се демонстрира конкурентното действие на нелинейностите наложени от дробния порядък μ и параметъра m , и как това противоборство променя формата на апроксимиращия профил от вдлъбнат (слаб ефект на μ) до изпъкнал (силен ефект на m) и обратно.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Korabel N., Klages R., Chechkin A.V., Sokolov I.M., Gonchar V.Yu, Fractal properties of anomalous diffusion in intermittent maps, *Physical Review E*, 75, (2007), 1539-3755/2007/75(3)/036213(14).
- [2] Kosztolowicz T., Subdiffusion in a system with a thick membrane, *Journal of Membrane Science*, 320 (2008), 1-2, pp. 492-499.
- [3] Dokoumetzidis A., Macheras P., Fractional kinetics in drug absorption and disposition processes, *J Pharmacokinetics and Pharmacodynamics* (2009) 36, 2, 165-178.
- [4] Nigmatullin R. R., The realization of the generalized transfer equation in a medium with fractal geometry, *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, 133 (1986), 1, 425-430.
- [5] Li Y., G. Farrher G., Kimmich R., Sub- and superdiffusion molecular displacement laws in disordered porous media probed by nuclear magnetic resonance, *Phys. Rev. E*, 74 (2006), 6, article 066309.
- [6] Berkowitz B., Scher H., Silliman S.E., Anomalous transport in laboratory-scale, heterogeneous porous media, *Water Resources Research*, 36 (2000), 1, pp. 149-158.
- [7] Povstenko Yu., Time-fractional radial diffusion in a sphere, *Nonlinear Dynamics*, 53 (2008), 1-2, pp. 55-65.
- [8] Metzler R., Klafter J., The random walk's guide to anomalous diffusion: A fractional dynamics approach, *Physics Report*, 39 (2000), 1, pp. 1-77.
- [9] Metzler R., Klafter J., The restaurant at the end of the random walk: Recent developments in the description of anomalous transport by fractional dynamics, *Journal of Physics A*, 37 (2004), 31, pp. 161-208.
- [10] Trujillo J., Fractional models: Sub and superdiffusive, and undifferentiable solutions, in *Innovation in Engineering Computational Technology*, B. H. V. Topping, G. Montero, and R. Montenegro, eds., Sax-Coburg Publ., 2006, pp. 371-402.
- [11] Nakagawa J., Sakamoto K., Yamamoto M., Overview to mathematical analysis for fractional diffusion equations—new mathematical aspects motivated by industrial collaboration, *Journal of Math-for-Industry*, Vol.2(2010A-10), pp.99-108.
- [12] Narahari Achar B.N., Hanneken J.W., Fractional radial diffusion in a cylinder, *Journal of Molecular Liquids*, 114 (2004), 1, pp. 147-151.
- [13] Djordjevic V.D., Atanackovic T.M., Similarity solutions to nonlinear heat conduction and Burgers/Korteweg-deVries fractional equations, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 222 (2008), 2, pp. 701-714.
- [14] Langlands T.A.M., Solution of a modified fractional diffusion equation, *Physica A*, 367 (2006), pp. 136-144.
- [15] Luchko Yu. F., Srivastava H.M., The exact solution of certain differential equations of fractional order by using operational calculus, *Computers and Math. Application*, 29 (1995), 8, pp.73-85.
- [16] Das, S., Gupta, P.K., Ghosh, P., An approximate analytical solution of Nonlinear Fractional Diffusion Equation, *International Journal of Nonlinear Science*, 12(2011), 3, pp.339-346.
- [17] Diethelm K., Ford J.N., Freed A.D., Luchko Y., Algorithms for the fractional calculus: a selection of numerical methods, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194 (2005), 6-8, pp. 743-773.
- [18] Das, S., A note on fractional diffusion equation, *Chaos, Solitons and Fractals*, 42 (2009), 4, 2074-2079.
- [19] Al-Rabtah, A., Ertürk, V.S., Momani, S., Solutions of a fractional oscillator by using differential transform method, *Computers and Mathematics with Applications*, 59 (2009), 3, pp. 1356-1362.
- [20] Hristov J., Heat-Balance Integral to Fractional (Half-Time) Heat Diffusion Sub-Model, *Thermal Science*, 14 (2010), 2, pp. 291-316.
- [21] Hristov J., Starting radial subdiffusion from a central point through a diverging medium (a sphere): Heat-balance Integral Method, *Thermal Science*, 15 (2011b), Supl. 1, pp.S5-S20.
- [22] Hristov J., Approximate Solutions to Fractional Subdiffusion Equations: The heat-balance integral method, *The European Physical Journal-Special Topics*, 193(2011a), 1, pp.229-243.
- [23] Hristov J., Double Integral-Balance Method to the Fractional Subdiffusion Equation: Approximate solutions, optimization problems to be resolved and numerical simulations, *J. Vibration and Control* (SAGE) DOI: 10.1177/1077546315622773
- [24] Hill, J.M., Similarity solutions for nonlinear diffusion- a new integration procedure, *J. Eng, Math*, 23 (1989), 1, pp.141-155.
- [25] N. F. Smyth, N.F., Hill, J.M., High-Order Nonlinear Diffusion, *IMA Journal of Applied Mathematics*, 40 (1988), 1, pp. 73-86.
- [26] Pattle, R. E. Diffusion from an instantaneous point source with concentration-dependent coefficient, *Quart.J. Mech. Appl. Math.*, 12 (1959), 4, pp. 407-409.
- [27] Prasad, S.N., and Salomon, J.B., A new method for analytical solution of a degenerate diffusion equation, *Adv. Water Research*, 28 (2005), 10, pp. 1091-1101.
- [28] Gandarias, M.L., New symmetries for a model of fast diffusion. *Phys. Lett. A*. 286(2001), 2-3, 153-160.
- [29] Guo, J.S., Y. Y. Guo, Y.Y., On a fast diffusion equation with source. *Tohoku Math. J.*, 53(2001), 571-579.
- [30] Adomian, G. *Solving frontier problems of physics: The decomposition method*. Kluwer

- Academic Publishers, Boston and London (1994).
- [31] He, J.H, Homotopy perturbation technique, *Comp. meth. Appl. Mech. Eng.*, 178 (1999),3-4, 257-262.
- [32] Das, S., Vishal., K., Gupta,P.K., Solution of the nonlinear fractional diffusion equation with adsorbent term and external force, *Appl. Math. Model.*, 35 (2011), 8, 3970-3979.
- [33] Sun, H.S., Meerschaert, M.M., Zang., Y., Zhu, J., Chen, W. , A fractal Richard's equation to capture the non-Boltzmann scaling of water transport in unsaturated media, *Adv. Water Res.*, 52 (2013), pp.292-295.
- [34] Plociniczak, L., Okrasinska, H., Approximate selfsimilar solutions to a nonlinear diffusion equation with time-fractional derivative, *Physica D*, 261 (2013),10, 85-91
- [35] Goodman T.R., Application of Integral Methods to Transient Nonlinear Heat Transfer, *Advances in Heat Transfer*, T. F. Irvine and J. P. Hartnett, eds., 1 (1964), Academic Press, San Diego, CA, pp. 51-122.
- [36] Hristov J., A Short-Distance Integral-Balance Solution to a Strong Subdiffusion Equation: A Weak Power-Law Profile, *Int. Rev. Chem. Eng*, 2 (2010b), 5, pp. 555-563
- [37] Hristov, J. Transient Flow of A Generalized Second Grade Fluid Due to a Constant Surface Shear Stress: an approximate Integral- Balance Solution , *Int. Rev. Chem. Eng.*, 3 (2011a), 6, pp. 802-809.
- [38] Hristov, J. Integral-Balance Solution to the Stokes' First Problem of a Viscoelastic Generalized Second Grade Fluid, *Thermal Science*, 16 (2012a), 2, pp. 395-410.
- [39] Hristov, J., A Note on the Integral Approach to non-Linear Heat Conduction with Jeffrey's Fading Memory, *Thermal Science*, 17 (2013), 3, pp.733-737. .
- [40] Approximate solutions to time-fractional models by integral balance approach, Chapter 5, In: *Fractional Dynamics* , C. Cattani, H.M. Srivastava, Xia-Jun Yang, (eds), De Gruyter Open, 2015, pp.78-109.
- [41] Hristov J., Diffusion Models with Weakly Singular Kernels in the Fading Memories: How the Integral-Balance Method can be Applied?, *Thermal Science*, 18(3) (2014), pp. 947-957.
- [42] Hristov J., Integral solutions to transient nonlinear heat (mass) diffusion with a power-law diffusivity: a semi-infinite medium with fixed boundary conditions, *Heat Mass Transfer*, 52 (3) (2016), pp.635-655
- [43] Fabre,A., Hristov,J., On the integral-balance approach to the transient heat conduction with linearly temperature-dependent thermal diffusivity, *Heat Mass Transfer*,vol.53,no.1,pp 177-204, January 2017.
- [44]I. Podlubny, *Fractional Differential Equations*, Academic Press, New York, 1999
- [45] Myers, T., Optimizing the exponent in the heat balance and refined integral methods, *Int. Comm. Heat Mass Transfer*, 44 (2008), 2, pp. 143-147.
- [46] Sadoun, N., Si-Ahmed, E.K., Colinet, P., On the refined integral method for one-phase Stefan problem with time-dependent boundary conditions, *Appl. Math. Model.*, 30 (2006), 6, pp.531-544.
- [47] Hristov, J., The heat-balance integral method by a parabolic profile with unspecified exponent: Analysis and benchmark exercises, *Thermal Science*, 13 (2009), 2, pp.22-48.
- [48] Hristov, J., Integral-Balance Solutions To Applied Models Involving Time-Fractional Derivatives: A Scope of the Method and some results thereof, *Commun. Frac. Calc.*, 4(2013), 2, pp. 64-104.
- [49] Hristov, J. Transient Flow of A Generalized Second Grade Fluid Due to a Constant Surface Shear Stress: an approximate Integral-Balance Solution , *Int. Rev. Chem. Eng.*, 3 (2011), 6, pp. 802-809.
- [50] Mitchell, S. L., Myers, T. G., Application of standard and refined heat balance integral methods to one-dimensional Stefan problems, *SIAM Review*, 52 (2010), 1, pp. 57-86.
- [51] Ames WF *Nonlinear partial differential equation in engineering*. Academic Press N.Y. ,1965
- [52] Zener, C., Theory of growth of spherical precipitates from solid solutions, *J Appl Phys*, vol.20, no.10, pp.950-953,1949.
- [53] Oldham, K.B., Spanier, J., *The fractional calculus*, New York: Academic press, N.Y. 1974.
- [54] Langford, D., The heat balance integral method, *Int. J. Heat Mass Transfer*,16 (1973),12, pp.2424-2428.
- [55] Kosztolowicz, T., Dworecki,K., Mrowczynsky,St., How to measure subdiffusion parameters, *Phys Rev Lett*, 94 (2005)170602. :10.1103/PhysRevLett.94.170602 .
- [56] Kosztolowicz, T., Transport in diffusive-sub diffusive system, *Acta Physica Polonica B*, 36(5) (2005),5 1635-1639.
- [57] Kosztolowicz, T., Dworecki,K., Mrowczynsky,St., Measuring subdiffusion parameters, *Phys Rev E*, 71 (2005) 041105.
- [58] Dworecki,K., Slezak,A., Ornal-Wasik,B., Wasik,S., Evolution of concentration field in a membrane system, *J Biochem. Biophys. Methods* 62 (2005) ,2, 153-162.
- [59] El-Ghany El-Abd, A., Milczarek, J.J., Neutron radiography study of water absorption in porous building materials: anomalous diffusion analysis. , *J. Phys D: Appl. Phys*, 37 (2004), 16, 2305-2313.

ГЛАВА 2.4

СУБДИФУЗИОНЕН МОДЕЛ С КОЕФИЦИЕНТ ЗАВИСЕЩ ОТ ВРЕМЕТО*

Тази глава представя приближено интегрално решение на дробно по време дифузионно уравнение, от порядък $0 < \mu < 1$, с коефициент зависещ от времето по степенен закон $D(t) = D_0 t^\beta$, където $0 < \beta < 1$. Формата на полученото решение, разпространяващо се в полу-безкрайна среда и оценено чрез анализ на вторият момент, позволява да се заключи, че в зависимост от стойността на сумата $(\mu + \beta)$ уравнението моделира субдифузионен пренос ($\mu + \beta < 1$), супердифузионен пренос ($\mu + \beta > 1$) или Гаусова (нормална) дифузия за $(\mu + \beta = 1)$. Оптималните експоненти на приближените решения са определени чрез минимизация на средноквадратичната грешка в границите на дифузионния слой.

1. ВЪВЕДЕНИЕ

Дробните диференциални уравнения (FDEs) са удобни за моделиране на аномални дифузионни процеси като *субдифузия* и *супердифузия* в комплекси и нееднородни среди [1], процеси на турбулентен пренос [2], както с класическия нелокален подход включващи ефект на памет [3] така и при използване на локални производни [4]. Аналитичните решения на FDEs са трудни за получаване [5], повечето от тях са приближени по природа [6-10], но крайната им форма е неподходяща за анализ и приложения (for post-solution applications and engineering analysis). Най-често срещания подход е използване на числени методи като: метод на Галъоркин [11],

тау-метод [12] спектрален метод [13], но аналитичните решения са редки [14-16].

Повечето от FDEs са с постоянен [17,18], зависещ от концентрацията [19] или пространствено-зависим дифузионен коефициент [15,16], в зависимост от специфичните особености на моделирания преносен процес.

Тази глава фокусира вниманието върху едномерен субдифузионен модел (1a) с коефициент зависещ от времето (1b) като степенна функция $D = D_0 t^\beta$ [$m^2/s^{1-\beta}$] и използването на интегрален подход за получаване на приближено аналитично решение.

$$\frac{\partial^\mu u(x,t)}{\partial t^\mu} = D(t) \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2},$$

$$u(x,0) = 0, \quad u(0,t) = 1, \quad u(\infty,t) = 0 \quad (1a)$$

$$D(t) = D_0 t^\beta, \text{ за } \mu \geq 0 \text{ и } x > 0 \quad (1b)$$

Дробната по време производна в (1a) може да бъде лява производна на Riemann-Liouville (RL) (2a) или на Caputo (2b) [20]

$${}_{RL}D_t^\mu = \frac{1}{\Gamma(1-\mu)} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{f(x,t)}{(t-z)^{\mu-1}} dz, \quad 0 < \mu < 1 \quad (2a)$$

$${}_CD_t^\mu = \frac{1}{\Gamma(1-\mu)} \int_0^t \frac{1}{(t-z)^{\mu-1}} \frac{d}{dt} f(x,z) dz, \quad 0 < \mu < 1 \quad (2b)$$

$$\frac{\partial^\mu u(x,t)}{\partial t^\mu} = \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} \text{ за } \mu = 1 \quad (3)$$

Задачата (1a,b) е предложена от Fa and Lenzi [21] и решена чрез развитие на решението в ред (series expansion technique). Усилията в това решение (и последващия анализ) са насочени към първото време за преминаване (the first passage time) в полу-безкрайна и ограничена области. Сега, в тази глава и носещата я публикация, ние

* Публикувано като: Hristov J., Subdiffusion model with time-dependent diffusion coefficient: Integral-balance solution and analysis, *Thermal Science*, 21(2017),1A, pp.69-80 ; DOI: [10.2298/TSCI160427247H](https://doi.org/10.2298/TSCI160427247H)

представяме приближено аналитично решение използващо метода на интегрален баланс [22,23], успешно прилаган за решаване на подобни модели с дробни производни по време [24,25] и пространство [26,27]. Решението на задачата на Дирихле за модела (1a,b), с нулеви начални условия и дробни по време производни на Riemann-Liouville, е използвано като пример демонстриращ възможностите на метода .

2. РЕШЕНИЕ НА ЗАДАЧАТА НА ДИРИХЛЕ

2.1. Интегрален подход към субдифузионното уравнение

Нека разгледаме у-ние (1a) с начални и гранични условия

$$u(x,0)=0, \quad u(0,t)=1$$

$$\text{за } u(\infty,t)=0 \text{ и } t>0 \quad (4a,b,c)$$

Принципът на дифузионен слой с крайна ,формиращ рязък фронт на решението сменя условието $u(\infty,t)=0$ с две нови условия

$$u(0)=1, \quad u(\delta)=\frac{\partial}{\partial x}u(\delta)=0 \quad (5a,b,c)$$

Еднократното интегриране по дължината на дифузионния слой, познато НВІМ, води до интегрално съотношение [22,23] ,където *градиентът при $x=0$, се определи чрез използвания апроксимиращ профил.* Този недостатък се избягва с прилагане на двойно интегриране (DІМ) предложен за решаване на нелинейни задачи с локални производни от цял порядък ($\mu=1$) [28, 29] и успешно използван за решаване на субдифузионни уравнения [24,25] .

Съгласно DІМ [24,25] интегралното съотношение е

$$\int_0^\delta \left(\int_x^\delta \frac{\partial^\mu u(x,t)}{\partial t^\mu} dx \right) dx = D(t)u(0,t) \quad (6)$$

Следователно, дясната страна на (6) зависи само от граничното условие на граница на $x=0$.

2.2. Апроксимиращ профил и дълбочина на проникване

Приближеното решение използва параболичен профил с недефинирана експонента [23-27] : $u_a(x,\delta)=(1-x/\delta)^n$, $0 \leq x \leq \delta$, $n>0$. Този профил изпълнява граничните условия (5a,b, c) и формира две зони: $u_a(x)>0$ за $x<\delta$ и $u_a(x)=0$ за $x \geq \delta$. Решението използващо този апроксимиращ профил изисква $n>0$, но зависеща от дробния порядък μ и експонентата β . В този момент, ние се обръщаме към процедурата на интегриране в лявата страна на (9) след заместване на $u(x,t)$ с профила $u_a(x,\delta)$ (виж [24] и [25])

$$\begin{aligned} \int_0^\delta \left(\int_x^\delta \frac{\partial^\mu}{\partial t^\mu} \left(1 - \frac{x}{\delta} \right)^n dx \right) dx &= \\ &= \frac{1}{(n+1)(n+2)} \frac{\partial^\mu \delta^2}{\partial t^\mu} \end{aligned} \quad (10)$$

Сега, с коефициент $D(t)=D_0 t^\beta$ и $u(0,t)=1$ се получава уравнението за определяне на δ

$$\frac{\partial^\mu \delta^2}{\partial t^\mu} = D_0 N t^\beta, \quad N=(n+1)(n+2) \quad (8a,b)$$

Лапласовата трансформация на (8a) е $\delta^2(s)=D_0 N \Gamma(1+\beta) s^{-(1+\beta+\mu)}$. Тогава, обратната Лапласова трансформация води до

$$\delta(t)=\sqrt{D_0 t^{\mu+\beta}} \sqrt{NG(\mu,\beta)}, \quad (9a,b)$$

$$G(\mu, \beta) = \frac{\Gamma(1+\beta)}{\Gamma[1+(\mu+\beta)]} \quad (9c)$$

За $\beta = 0$ (9b) се редуцира до DIM решение [24,25] $\delta_{\mu, \beta=0}(t) = \sqrt{D_0 t^\mu} \sqrt{N/\Gamma(1+\mu)}$. Освен това, за $\mu = 1$ и $\beta = 0$ имаме $G(1, 0) = 1$ и решението (12b) се редуцира до DIM решение на класическото дифузионно уравнение (Гаусова дифузия) с производни от цял порядък (виж коментарите в виж [24] и [25]). В специалния случай, когато $\mu + \beta = 1$, коефициентът $G(\mu, \beta)$ се редуцира до $G(\mu + \beta = 1) = \Gamma(1 + \beta)$ и $\delta_{\mu+\beta=1}(t) = \sqrt{D_0 t} \sqrt{N\Gamma(1+\beta)}$ зависи само от експонентата β .

Следователно, фронтът на решението се движи по закона $t^{(\mu+\beta)/2}$ и основните възникващи въпроси, независимо че модела. (1a) е дефиниран като субдифузионен, са:

- Как скоростта на фронта зависи от едновременното действие на експонентата β и дробния порядък μ ?, и
- Съществуват ли ограничения за експонентата β отчитайки се разглежда модел на субдифузионен пренос?

Отговорите на тези въпроси да дадени в следващата точка.

2.3. Скорост на фронта и ограничения върху експонентата β

Тъй като фронтът е пропорционален на $t^{(\mu+\beta)/2}$ за $0 < \mu < 1$, то е необходимо да дефинира областта на промяна на β .

Понеже δ е физически дефинирана дължина, тя трябва да е положителна величина.

Това изискване отговаря на условието $\mu + \beta > 0$, което може да бъде изпълнено за всяко $\beta > 0$. Със скоростта на фронта $d\delta/dt = [(\mu + \beta)/2] t^{(\mu+\beta)/2-1}$, условието $d\delta/dt > 0$ изисква $\mu + \beta > 2 \Rightarrow \beta > 2 - \mu$, и отчитайки границите на промяна на μ , условието се изпълнява за $\beta > 1$. В противен случай, развитието на фронта с намаляваща скорост е възможно при $\mu + \beta < 2$; това условие, заедно с основното ($\mu + \beta > 0$), изисква $\beta < 1$.

По нататък, при $0 < \mu + \beta < 1$ имаме субдифузионен режим, докато при $\mu + \beta > 1$ режимът е супердифузионен. В светлината на коментарите за ефекта на β върху скоростта на фронта, условието за ускоряващ се фронт е $\mu + \beta > 2 \Rightarrow \beta > 2 - \mu$, което съответствува на супердифузионен режим. В обратния случай, когато имаме фронт с намаляваща скорост, т.е. $\mu + \beta < 2 \Rightarrow \beta < 2 - \mu \Rightarrow \beta < 1$, се очаква преход от субдифузия (за $\mu + \beta < 1$) към супердифузия (за $\mu + \beta > 1$). В специалния случай, когато $\mu + \beta = 0 \Rightarrow \beta = -\mu$ имаме $\delta^2 = \text{const.}$ и $d\delta/dt = 0$, т.е. стационарен режим [21]. За $\mu + \beta = 1$, се получава, че $\delta \equiv \sqrt{t}$, което е решение за дифузия на Фик.

Условието $\beta > 0$ означава дифузия с коефициент растящ във времето, докато за $\beta < 0$ поведението е точно обратно. За първия случай тук се използва термина *бърза дифузия* (fast diffusion), докато за втория терминът е *бавна дифузия* (slow diffusion).

За случая на бавната дифузия когато $\beta < 0$ (задачата е решена в [21]) резултатът е $\delta \equiv t^{(\mu-\beta)/2}$ и $d\delta/dt = [(\mu-\beta)/2]t^{(\mu-\beta)/2-1}$. Условието $\beta < 0$ за фронт на решението разпространяващ се в една посока е физически обоснован резултат. В допълнение, имаме: при $\mu - \beta - 2 > 0 \Rightarrow \beta < 2 - \mu$ решението е с ускоряващ се фронт, докато за $\mu - \beta - 2 < 0 \Rightarrow \beta > 2 - \mu$ фронтът се забавя във времето. И двете ситуации изискват $\beta > 1$, но отчитайки факта, че за $0 < \mu < 1$ ние получаваме условието $\mu - \beta - 2 < 0$ и забавящо се във времето движение на фронта, което отваря на бавен субдифузионен (*slow diffusion process*).

Разглеждайки средноквадратичното преместване ние имаме $\langle x^2 \rangle \equiv \delta^2 \equiv t^{\mu-\beta}$ и бавната субдифузия ще съществува при $\mu - \beta < 1$, следователно *супердифузионен процес е невъзможен когато $\beta < 0$* . По-нататък в това изследване, анализът е ограничен за $\beta > 0$, а случаите с $\beta < 0$ са извън това изследване.

2.4. Приближено решение и свързани проблеми

2.4.1. Приближен профил

След установяване на функционалната зависимост описваща движението на фронта, приближеното решение е

$$u_a = \left(1 - \frac{x}{\sqrt{D_0 t^{\mu+\beta}} \sqrt{NG(\mu, \beta)}} \right)^n = \left(1 - \frac{\xi}{N_p(n, \mu, \beta)} \right)^n \quad (10)$$

$$N_p = \sqrt{NG(\mu, \beta)} = \sqrt{(n+1)(n+2) \frac{\Gamma(1+\beta)}{\Gamma[1+(\mu+\beta)]}} \quad (11)$$

Това приближено решение дефинира по естествен път не-Болцманова автомоделна променлива

$$\xi = x / \sqrt{D_0 t^{\mu+\beta}}$$

2.4.2. Средно квадратично отместване (Mean square displacement)

Следвайки работата на Fa и Lenzi [21], средноквадратичното преместване (вторият момент на разпределението) е (15a), докато с DIM решение се получава (15b)

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle_{FL} &= 2 \frac{D_0 \Gamma(1+\beta)}{\Gamma(1+\mu+\beta)} t^{\mu+\beta}, \\ \langle x^2 \rangle_{DIM} &\equiv \delta^2 \equiv \frac{D_0 \Gamma(1+\beta)}{\Gamma(1+\mu+\beta)} t^{\mu+\beta} \end{aligned} \quad (12a,b)$$

От анализа за движението на фронта и коментарите в [21], средноквадратичното преместване (12b) ясно показва, че *субдифузионен процес възниква, когато $0 < \mu + \beta < 1$* , докато за *супердифузионен се изисква $\mu + \beta > 1$* .

2.4.3. Време за първо преминаване: анализ от различни гледни точки

Ако разгледаме област с крайна дължина т.е. за $0 \leq x \leq L$ с гранични условия $u(L, t) = 0$ и $u_x(L, t) = 0$, времето, за което проникващия фронт $\delta(t)$ достига границата $x = L$ е

$$L^2 = (D_0 t_L^{\mu+\beta}) NG(\mu, \beta) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow t_L = L^{\frac{2}{\mu+\beta}} \left[\frac{1}{D_0} \frac{1}{NG(\mu, \beta)} \right]^{\frac{1}{\mu+\beta}} \quad (13)$$

Това е практически ориентиран подход, идващ по аналогия от интегралните решения за модели с производни от цял порядък, и т.н. подгряващ период (*pre-heating period*) [22,23].

Сега, ние продължаваме, с класическата дефиниция за *разпределението на време за първо преминаване* (*the first passage time distribution*, FPT) [21,29-31], което е $F(t) = -df_t/dt$, където $f_t = \int_0^L u(x, t) dx$. Допускаме за анализа на настоящото изследване, че $L = \delta(t)$, защото нямаме дифузия при $x > \delta(t)$. Тогава, с приближеното решение (13) и изразът (12,b) за $\delta(t)$ получаваме

$$F_\delta(t) = -\frac{d}{dt} \int_0^{\delta(t)} \left(1 - \frac{x}{\delta(t)} \right)^n dx =$$

$$= t^{\frac{\mu+\beta-2}{2}} \frac{\mu+\beta}{2} \sqrt{D_0} \sqrt{\frac{n+2}{n+1}} G(\mu, \beta) \quad (14a,b,c)$$

От условията за съществуване на субдифузионен режим, коментирани по-горе, имаме условието $\mu + \beta - 2 > 0 \Rightarrow \beta > 2 - \mu$, съответстващо на *ускоряващ се във времето фронт* и *супердифузия*.

Стационарното решение, с постоянна скорост на $\delta(t)$ за $\mu + \beta = 0$, води до $F_\delta(t) = 0$. Обратно, ако $\mu + \beta - 2 < 0 \Rightarrow \beta < 2 - \mu \Rightarrow \beta < 1$, то имаме *субдифузионен пренос*. Освен това, *средното време за първо преминаване* (*the mean*

first passage time MFPT) посредством $\delta(t) = L$

[30-31] се представя като

$$T_{FPT} = \int_0^\infty \left(\int_0^L u(x, t) dx \right) dt \Rightarrow T_{FPT(u_a)} =$$

$$= \frac{\sqrt{D_0}}{(n+1) N_p} \left[\frac{1}{\frac{\mu+\beta}{2} + 1} \right] \left(t^{\frac{\mu+\beta}{2} + 1} \right) \Big|_0^\infty \rightarrow \infty \quad (15a,b)$$

Следователно, определянето на MFPT на базата на приближеното интегрално решение (метод с двойно интегриране) е съпоставим резултат, който не противоречи на резултатите на Fa and Lenzi [21,30,31] и анализът на Yuste and Lindenberg [32], а по-точно че: *средното време за първо преминаване е безкрайно* (*the mean first passage time for the subdiffusion transport is infinite*).

3. ОПТИМИЗИРАНЕ НА ПРИБЛИЖЕНОТО РЕШЕНИЕ

3.1. Функция на грешката и апроксимация на дробната производна

Експонентата n на апроксимацията профил е единствения параметър който не може да се определи от граничните условия при $x = 0$ и (5a,b,c) [22-27] и това налага използване на допълнителни ограничения. Използваният тук подход е чрез минимизиране на остатъчната функция на грешката съответстваща на у-ние (1a) при използване на апроксимацията профил. В този контекст, функцията на остатъчната грешка съответстваща на у-ние (1a) е

$$R(u_a(x, t)) = \frac{\partial^\mu u_a(x, t)}{\partial t^\mu} - D(t) \frac{\partial^2 u_a(x, t)}{\partial x^2} \quad (16)$$

Сега, задачата, която трябва да се реши, преди минимизиране на (16), се формулира по

следния начин: как да се трябва да се представи дробната по време производна $\partial^\mu u_a(x,t)/\partial t^\mu$ при използване на апроксимацията профил, за да се проведат успешно изчисленията при минимизацията на $R(u_a(x,t))$? За решаването на тази междинна задача е използвана техниката развита и приложена в [25-27] (виж Глава 2.3 и Глава 2.3).

3.2. Оптимални експоненти на приближените решения

Ако се приложи критерият на Langford [32] за интегрално решение, то условието е

$$E_L(n, \mu, \beta, t) = \int_0^\delta [R_{RL}(\eta, \mu, \beta, t)]^2 dx \rightarrow \min \quad (17)$$

В термини на безизмерната променлива ξ , средноквадратичната функция на грешката (17) може да се представи като отношение $E_L(n, \alpha, \beta, t) = e_L(n, \mu, \beta)/t^{2\mu}$, което затихва във времето със скорост пропорционална на $t^{2\mu}$. Тук $e_L(n, \mu, \beta)$ е функция, която не зависи от времето и се дефинира като

$$e_L(n, \mu, \beta) = \int_0^1 \left[{}_{RL}\Phi(n, \eta, \mu, \beta) - \frac{n(n-1)(1-\eta)^{n-2}}{N_p(n, \mu, \beta)} \right]^2 d\eta \rightarrow \min \quad (18)$$

Определянето на оптималните стойности на n , чрез минимизация на $e_L(n, \mu, \beta)$ е проведено според процедурата обяснена в [26, 27], където беше установено, че първите 9 члена на сходящия ред са достатъчни за добро приближение на ${}_{RL}\Phi(n, \eta, \mu, \beta)$ и да се изчисли

интеграла в (18), с използване на Maple, като примерна програма. Оптималните експоненти определени чрез тази технология са представени в Таблица 1. Тези числени данни позволяват да отбележат някои основни характеристики, а именно

1. Експонентата на приближеното решение, в случай на субдифузионен пренос ($\mu + \beta < 1$), намалява с нарастване на μ , ако стойността на β е фиксирана. От друга страна, когато μ е фиксиран, то оптималната експонента расте с нарастване на стойността на β .
2. Диагоналът на Таблица 1 е формиран от клетки (с плътен шрифт) съдържащи оптимални експоненти за случаите когато $\mu + \beta = 1$. В тези специални случаи имаме $\delta^2 \equiv t$ и оптималните експоненти намаляват от върха в десния горен ъгъл ($\mu = 0.1, \beta = 0.9$) в посока на долния ляв ъгъл ($\mu = 0.9, \beta = 0.1$). Диагоналът разделя данните в Таблица 1 на две групи: субдифузионна група (subdiffusive group, LG) наляво от диагонала и супердифузионна група (superdiffusive group, RG) надясно от диагонала.
3. За субдифузионната група, основното поведение беше описано в точка 1. Това е достатъчно добре демонстрирано за $\mu = 0.1$ и $0.1 \leq \beta \leq 0.9$. С нарастване на μ , дясната граница на субдифузионната група се дефинира от диагонала на таблицата ($\mu + \beta = 1$). Важно е да се отбележи, че в близост до този диагонал се наблюдава

аномално поведение на експонентите, започващо в близост до зоната, където $\mu + \beta = 1$. Преминването през диагонала $\mu + \beta = 1$ се демонстрира по подобен начин, но след това, с нарастване на β , експонентите нарастват. Това преходно поведение на експонентите на профила са свързани с промяна на скоростта на фронта $d\delta/dt$, а по точно: от забавящ се фронт на субдифузионен пренос (*decelerating front of subdiffusion*) към ускоряващ се фронт в условия на супердифузия (*accelerating front of superdiffusion*).

4. Поведението на оптималните експоненти, коментирано по-горе, може да се свърже с множителя $G(\mu, \beta)$ в израза за дълбочината на дифузионния слой. $G(\mu, \beta)$ се променя в тесен интервал $0.5 \leq G(\mu, \beta) \leq 1$ (виж Фиг. 1), но поведението му е силно нелинейно.

4. ЧИСЛЕНИ ЕКСПЕРИМЕНТИ

Приближените решения са представени графично на Фиг. 2. За $\mu = 0.1$ (Фиг.2a) имаме напълно субдифузионни профили, докато за $\beta = 0.9$ (Фиг.2b) разпределенията съответствуват на супердифузионен процес. В тези две гранични ситуации, както и при междинните случаи (Фиг.2b, c) подреждането на профилите, от дясно наляво строго следва нарастването на експонентата β . Това подреждане може да се обясни с ефекта на β върху $du/d\xi$, а именно: (Фиг.2b, c) подреждането на профилите, от дясно наляво строго следва нарастването на

експонентата β . Това подреждане може да се обясни с ефекта на β върху $du/d\xi$, а именно:

- Производната $du/d\xi = -(n/N_p)(1-\xi/N_p)^{n-1}$ е функция на ξ защото за дадени μ и β , знаменателят N_p е константа.
- Както беше показано вече, експонентата n расте с нарастване на стойността на β . Следователно, ако ξ е фиксирано (в избрана точка от профила), при нарастване на стойността на β , числената стойност N_p и разликата $(1-\xi/N_p)$ също ще нарастват. От тук следва, че големите стойности на β , означават големи стойности на производната $du/d\xi$ (по абсолютна стойност защото реално $du/d\xi < 0$) и графично кривите съответстващи на големи стойности на β са по-стръмни и разположени по-наляво от профилите съответстващи на малки стойности на β .

Едновременният ефект на μ и β може визуално да се представи чрез тримерни профили за фиксирани стойности от безразмерните профили (виж Фиг. 3): в близост до средата на профила (Фиг.3a), и за големи ξ (Фиг.3b и Фиг.3c).

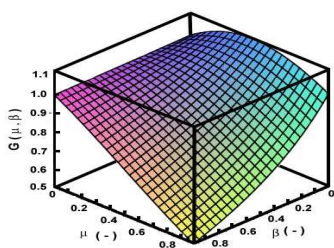
Поведението на повърхностите на Фиг. 3 наподобява това на функцията $G(\mu, \beta)$ (виж Фиг.1) защото приближеното решение u_a може да се представи като $u_a(\xi) = (1 - k_n / \sqrt{G(\mu, \beta)})^n$, където $k_n = \xi/N$.

Числените резултати ясно демонстрират основното поведение на приближените решения получени чрез метода на интегралния баланс.

Горната граница на β беше избрана $\beta = 0.9$, тъй като за $\beta > 0.9$ режимът е само супердифузионен.

Таблица 1. Оптимални експоненти за $\mu \in [0.1, 0.9]$ и $\beta \in [0.1, 0.9]$

$\alpha \downarrow$	$\beta \rightarrow$	0.0*	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
0.1		3.806*	3.049	3.160	3.969	3.642	3.712	3.929	3.934	4.116	4.691
$E_L \times 10^3$			3.961	2.840	1.525	0.081	0.789	1.972	2.070	0.141	2.837
0.2		3.477*	3.470	3.736	3.908	3.969	4.074	4.312	3.917	4.894	4.888
$E_L \times 10^3$			5.100	4.72	2.861	4.341	0.653	8.211	0.299	0.276	1.784
0.3		3.529*	3.624	2.894	3.871	4.175	4.390	3.893	2.989	2.812	2.812
$E_L \times 10^3$			1.700	1.543	5.253	0.662	0.324	1.334	2.264	0.508	0.860
0.4		3.150*	3.703	2.920	3.857	4.808	4.779	2.844	2.970	2.812	2.835
$E_L \times 10^3$			0.333	1.340	2.131	1.400	4.981	2.850	4.823	0.750	0.835
0.5		3.477*	2.920	3.908	3.934	2.971	2.989	2.750	2.824	2.865	2.920
$E_L \times 10^3$			2.133	3.640	5.452	1.519	1.953	1.290	0.124	0.125	0.136
0.6		2.596*	3.926	3.917	3.087	2.611	2.763	2.862	2.906	3.060	3.554
$E_L \times 10^3$			0.124	0.243	2.408	8.119	1.174	6.016	0.127	0.126	0.744
0.7		2.022*	3.012	2.989	2.985	2.799	2.880	2.988	2.989	3.752	4.021
$E_L \times 10^3$			6.948	1.601	1.892	0.931	0.520	0.936	0.160	0.893	0.317
0.8		2.643*	2.997	3.006	2.989	2.925	3.105	2.447	2.447	4.235	3.977
$E_L \times 10^3$			2.629	2.111	1.512	0.154	2.230	0.386	1.300	2.111	3.604
0.9		2.310*	2.776	2.897	2.968	2.997	3.777	2.400	2.235	3.997	4.647
$E_L \times 10^3$			3.298	4.712	2.467	3.611	0.725	0.451	4.746	0.801	0.584
*-определено в [26] ; Плътен текст (в диагонала на таблицата) : случай на $\mu + \beta = 1$											

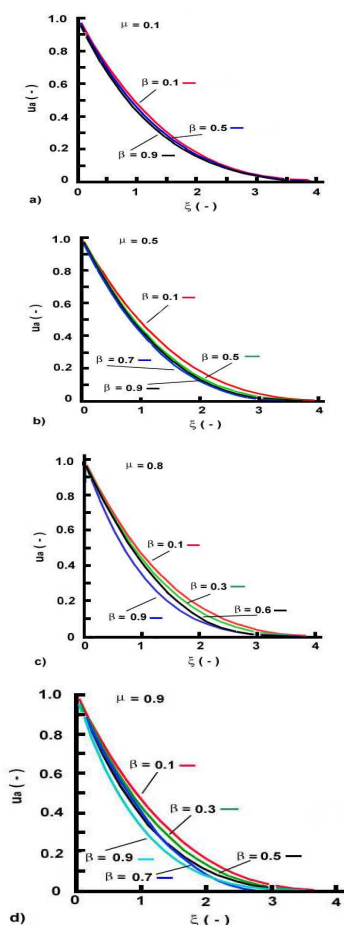


Фиг.1.Поведение на множителя

$$G(\mu, \beta) = \frac{\Gamma(1+\beta)}{\Gamma[1+(\mu+\beta)]} \text{ за } 0.01 \leq \mu \leq 0.99 \text{ и } 0.01 \leq \beta \leq 0.99$$

ИЗВОДИ

Използването на интегрален метод за получаване на приближено решение на субдифузионен модел със зависимост от времето



Фиг.2. Приблизени профили за различни стойности на дробния порядък μ и експонентата β като параметър коефициент, представен като степенна функция, $D(t) = D_0 t^\beta$, потвърждава аналитичните резултати на Fa and Lenzi [21], че вторият момент е степенна функция на времето с експонента $\mu + \beta$. Решението може да представлява

субдифузионен ($0 < \mu + \beta < 1$), супердифузионен ($\mu + \beta > 1$) и Гаусов режим ($\mu + \beta = 1$).

Решението е получено за случая на полу-безкрайна област чрез интегрален метод позволяващ да се изследва движението на фронта на решението. Този момент от решението позволява да се изследва основен проблем за първото време на преминаване в крайна област. Резултатът потвърждава основният резултат на [21,31], че при субдифузионен пренос времето за първо преминаване е безкрайно.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Nigmatullin, R.R., The realization of the generalized transfer equation in a medium with fractal geometry, *Physica Status Solidi (B) Basic Research.*, 133 (1986), 1, 425–430.
- [2] Bakunin ,O.G., Description of the Anomalous Diffusion of Fast Electrons by a Kinetic Equation with a Fractional Spatial Derivative, *Plasma Physics Reports*, Vol. 30, No. 4, 2004, pp. 338–342.
- [3] Hilfer, R., Applications of Fractional Calculus in Physics, World Scientific, 2000, Hackensack, NJ,USA.
- [4] Yang, X.J, Baleanu,D., Srivastava, H.M., Local Fractional Integral Transforms and Their Applications, Academic Press, 2015, London, UK.
- [5] Luchko, Yu, Srivastava,H.M., The exact solution of certain differential equations of fractional order by using operational calculus, *Comp. Math. Appl.*, 29 (1995),8, 73-85.
- [6] Nakagawa, J. ,Sakamoto,K.,Yamamoto, M., Overview to mathematical analysis for fractional diffusion equations–new mathematical aspects motivated by industrial collaboration, *J. Math-for-Indust.*, 2(2010A-10) 99-108
- [7] Das, S., Gupta, P.K., Ghosh, P., An approximate analytical solution of Nonlinear Fractional Diffusion Equation, *Appl. Math.Model.*,35 (2011) , 8, 4071-4076.
- [8] Wu, GC: Variational iteration method for solving the time-fractional diffusion equations in porous medium *Chin. Phys. B.* , 21, (2012a) , 22, Article ID 120504 ; DOI: 10.1088/1674-1056/21/12/120504
- [9] G.-C. Wu, D. Applications of the Variational Iteration Method to Fractional Diffusion

- Equations: Local versus Nonlocal Ones, *Int. Rev. Chem. Eng.*, 4(2012b),5,505-510.
- [10] G.-C. Wu, D. Baleanu, Variational iteration method for fractional calculus - a universal approach by Laplace transform, *Advances in Difference Equations*, 2013,2013:18; doi:10.1186/1687-1847-2013-18
- [11] El-Kady, M., El-Sayed, S.M., Salem, H.S., El-Gendi nodal Galerkin method for solving linear and nonlinear partial \fractional space equations, *Int. J. Latest Res. Sci. Technol.*, 2(2013),6,pp. 10-17.
- [12] Saadatmandi, A., Deghan, M., A tau approach for solution of the space fractional diffusion equation, *Comp. Math. Appl.*, 62 (2011), 3, pp.1135-1142.
- [13] Nie, N., Huang, J., Wang, W., tTang, Y., Solving spatial-fractional partial differential diffusion equations by spectral method., *J. Stat. Comp. Sim.*, 84 (2014),6,pp.1173-1189.
- [14] Ray, S.S, Analytical solution for the space fractional diffusion equation by two-step Adomian decomposition method, *Comp.Nonlinear Sci. Num. Simul.*, 14 92009), 4, pp. 1295-1306.
- [15] Huang, F., Liu, The space-time fractional diffusion equation with Caputo derivatives, *J.Appl. Math & Computing*, 19 (2005), 1-2, pp. 179-190.
- [16] Huang, F., Liu, The fundamental solution of the space-time fractional advection-diffusion equation, *J.Appl. Math & Computing*, 19 (2005), 1-2, pp. 339-350.
- [17] Meerschaert MM, Tadjeran C. Finite difference approximations for two-sided space-fractional partial differential equations. *Appl Numer Math.*, 56 (2006),1,pp.80–90.
- [18] Ervin,V.J., Heur, N., Roop, J., Numerical approximation of a time dependent, nonlinear , space-fractional diffusion equation, *SIAM J. Num Anal.*, 45 (2008),2, pp.572-591.
- [19] Das, S., A note on fractional diffusion equation, *Chaos, Solitons and Fractals*, 42 (2009), 4, 2074-2079.
- [20] Podlubny, I, *Fractional Differential Equations*, Academic Press, New York, 1999
- [21] Fa, K.S., Lenzi, E.K. , Time-fractional diffusion equation with time dependent diffusion coefficient, *Physica A*, 72 (2005) , article 011107 doi:/10.1103/PhysRevE.72.011107.
- [22] Goodman, T.R., Application of Integral Methods to Transient Nonlinear Heat Transfer, In: T. F. Irvine and J. P. Hartnett (Eds.), *Advances in Heat Transfer*, 1 (1964), Academic Press, San Diego, CA, pp. 51–122.
- [23] J.Hristov, The heat-balance integral method by a parabolic profile with unspecified exponent: Analysis and benchmark exercises. *Therm. Sci.*, 13 (2009) ,2, 22-48.
- [24] Hristov,J., Approximate solutions to time-fractional models by integral balance approach, In: C. Cattani, H.M. Srivastava, Xia-Jun Yang (Eds.), *Fractals and Fractional Dynamics*, De Gruyter Open, Berlin, 2015, pp.78- 109.
- [25] Hristov J., Double Integral-Balance Method to the Fractional Subdiffusion Equation: Approximate solutions, optimization problems to be resolved and numerical simulations, *J. Vibration and Control*, in press, DOI: 10.1177/1077546315622773
- [26] Hristov J., An approximate solution to the transient space-fractional diffusion equation: integral-balance approach, optimization problems and analyses , *Thermal Science*, 21 (2017), 1A,, pp. 309-321 : DOI:10.2298/TSCI160113075H
- [27] Hristov J., Transient space-fractional diffusion with a power-law superdiffusivity: Approximate integral-balance approach, *Fundamenta Informaticae*, 151 (2017) , 1-4,pp. 371–388
- [28] Volkov, V.N., Li-Orlov, V.K., A Refinement of the Integral Method in Solving the Heat Conduction Equation, *Heat Transfer Sov. Res.*, 2 (1970) 41-47.
- [29] Sadoun, N, Si-Ahmed, E.K., Colinet,P., On the refined integral method for one-phase Stefan problem with time-dependent boundary conditions, *Appl. Math. Model.*, 30 (2006) 531-544.
- [30] Fa, K.S., Lenzi, E.K. ,Anomalous diffusion, solutions, and the first passage time: Influence of diffusion coefficient, *Physical Review E*, 71 (2005) article 012101, doi: 10.1103/PhysRevE.71.012101
- [31] Fa, K.S., Lenzi, E.K. , Power law diffusion coefficient and anomalous diffusion: Analysis of solutions and the first passage time. *Physical Review E*, 67 (2003) article 061105, doi: 10.1103/PhysRevE.67.061105
- [32] Yuste, S.B., Lindenberg, K., Comments on first passage time for anomalous diffusion, *Physical Review E*, 69 (2004), article 033101, doi: 10.1103/PhysRevE.69.033101
- [32] Langford , D., The heat balance integral method, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 16 (1973), 12, pp.2424-2428.
- [33] Hristov J., Integral solutions to transient nonlinear heat (mass) diffusion with a power-law diffusivity: a semi-infinite medium with fixed boundary conditions, *Heat Mass Transfer*, 52 (2016), 3, pp.635-655.
- [34] Fabre, A., Jordan Hristov,J., On the integral-balance approach to the transient heat conduction with linearly temperature-dependent thermal diffusivity, *Heat Mass Transfer*, 53 (2017),1, pp 177–204 .

ГЛАВА 2.5

НЕСТАЦИОНАРНА СУПЕРДИФУЗИЯ С ПОСТОЯНЕН ДИФУЗИОНЕН КОЕФИЦИЕНТ*

Тази глава разглежда приближено аналитично решение на задача начални и гранични условия отнасяща се за дробно-диференциално уравнение с пространствена производна на Riemann–Liouville и постоянен дифузионен коефициент. Предложеното приближено решение се основа на концепцията за крайна дълбочина на проникване на дифузанта използвайки метода на интегрален баланс развитие в сходящ ред на апроксимация параболічен профил с недефинирана експонента. Развити са проблемите свързани с намиране на оптималната експонента на апроксимация параболічен профил.

1. ВЪВЕДЕНИЕ

Дробните диференциални уравнения (FDEs) свързани със суб-дифузионни и супер-дифузионни процеси възникващи във физиката [1], транспорт в порести среди [2], процеси с плазма [3] и турбулентни течения [4] моделират нелинеен дифузионен пренос. В много от тези случаи е трудно да се получат точни аналитични решения на FDEs [5] и повечето от тях са приближени решения [6,7,8,9,10,11,12, 13]. В доминиращите случаи се използват числени методи за решаване на FDEs [13,14,15,16,17, 19, 20].

Тук се представя приближено аналитично решение на едномерно, линейно и дробно по пространство, уравнение от порядък $1 < \beta < 2$ с постоянен дифузионен коефициент $D_\beta \left[m^\beta/s \right]$:

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = D_\beta \frac{\partial^\beta f(x,t)}{\partial x^\beta}, \quad f(x,0) = f_x(x,0) = 0,$$

$$f(0,t) = 1, \quad f(\infty,t) = 0 \quad (1)$$

Дробната по пространство производна в (1) е лява производна от порядък β от тип Riemann-Liouville (RL) (2a) или Caputo (2b) дефинирани като [18]

$${}_{RL}D_x^\beta = \frac{1}{\Gamma(2-\beta)} \frac{d^2}{dx^2} \int_0^x \frac{f(u,t)}{(x-u)^{\beta-1}} du, \quad (1 < \beta < 2) \quad (2a)$$

$${}_CD_x^\beta = \frac{1}{\Gamma(2-\beta)} \int_0^x \frac{1}{(x-u)^{\beta-1}} \frac{d^2}{dx^2} f(u,t) du \quad (2b)$$

$$\frac{\partial^\beta f(x,t)}{\partial x^\beta} = \frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial x^2} \quad \text{for } \beta = 2 \quad (2c)$$

Дробният оператор ${}_{RL}D_x^\beta$ може да се представи алтернативно като ${}_{RL}D_x^{1+\gamma}$ за $0 < \gamma < 1$ и по този начин, неявно, интерпретацията на нелинейната дифузия като стохастичен процес може да се представи чрез устойчиво разпределение на Levy (Levy stable flight) $(1+\gamma)/2 = \beta/2$ [22,23].

Най-често срещания подход за решаване на (1) е използването на числени методи [24, 25,26] като: метод на Гальоркин [27,28], тау-метод [29] и спектрален метод [30], докато аналитичните решения са редки в литературата [31,32,33, 34,35,36]. Трябва да се отбележи, че фундаментално решение на (1) е получено от Huang and Liu [34] чрез функции на Грийн и автомоделната променлива $\xi \equiv x/(D_\beta t)^{1/\beta}$.

Независимо от използването на мощни числени методи и приближени аналитични решения, в цитираните по-горе литературни източници,

* Публикувано като: Hristov J., An approximate solution to the transient space-fractional diffusion equation: Integral-balance approach, optimization problems and analyzes, *Thermal Science*, 21(2017),1A, pp.309-321, DOI: 10.2298/TSCI160113075H

получените резултати не са удобни за използване във физични и инженерни приложения. Това е основната причина за прилагането на интегралния метод [37,38], с цел получаване на приближени решения в затворена форма.

Разработеното приближено аналитично използва интегрален метод [37,38], преди това успешно използван за решаване на модели с дробни по време производни [39,40,41,42]. Методът е демонстриран чрез задача на Дирихле и нулеви начални условия, и основно с дробна по пространство производна на Riemann-Liouville.

2. РЕШЕНИЕ

2.1. Апроксимиращ профил и дробна по пространство производна от него: проблеми които трябва да бъдат решени

Решението използва параболичен профил с недефинирана експонента [35]

$$f_a(x) = \left(1 - \frac{x}{\delta}\right)^n, \quad 0 \leq x \leq \delta, \quad n > 0 \quad (7)$$

който изпълнява граничните условия на Гудман и формира две зони : $f_a(x) > 0$ за $x < \delta$ и $f_a(x) = 0$ за $x \geq \delta$.

Преди интегрирането на дясната част от интегралното решение (5b или 6d) замествайки $f(x,t)$ с $f_a(x) = (1 - x/\delta)^n$ ние трябва да видим как дробната по пространство производна работи с $f_a(x)$. Следвайки правилата за RL производна от биномиална функция $(C - cx)^p$ получаване [40]

$$\frac{d^\beta (C - cx)^n}{d(x-a)^\beta} = c^\beta \frac{(C - cx)^{n-\beta}}{\Gamma(-\beta)} B_x(-\beta, \beta - n), \quad (4a,b)$$

$$B_x(a, b) = \int_0^x y^{a-1} (1-y)^{b-1} dy$$

$B_x(-\beta, \beta - p)$ в израза (8a) е непълна Бета функция $B_x(a, b)$ с аргумент x , която при положителни цели стойности на двата параметъра a и b е дефинирана чрез (4b). Непълната Бета функция може да се представи в термини на елементарни функции, когато сумата $a + b$ е отрицателно цяло число [44,45,46]. В случая на у-ние (4), първият параметър в $B_x(-\beta, \beta - n)$ е отрицателен и сумата $(-\beta) + (\beta - n) = -n < 0$, което означава, че е необходимо $n > 0$. Този резултат, обаче, ограничава възможностите на използвания параболичен профил в този вид (3) и ни принуждава да се използват предварително дефинирани експоненти от цял порядък, както в класическия интегрален метод [37,38]. Следователно, необходимо е да се използва друг подход, водещ до алтернативно решение.

3.2. Пространствено интегриране на приближената дробна пространствена производна

3.2.1. Просто интегриране (NBIM)

С новата пространствената променлива в (2a) като $\eta = x/\delta$ където $0 \leq \eta \leq 1$, получаваме нова форма на апроксимиращата функция $f_a(x) \Rightarrow F_a(\eta) = (1 - \eta)^n$, дробната по пространство производна прима вида :

$$\frac{\partial^\beta f_a(x)}{\partial x^\beta} = \left(\frac{1}{\delta}\right)^\beta \frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} \quad (5)$$

Сменяйки променливата в интеграла (в дясната част) на като $x \rightarrow \eta = x/\delta$, ние получаваме

$$\begin{aligned} \int_0^\delta \frac{\partial^\beta f_a(x)}{\partial x^\beta} dx &= D_\beta \int_0^1 \delta \left(\frac{1}{\delta} \right)^\beta \frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} d\eta = \\ &= D_\beta \delta^{1-\beta} \int_0^1 \frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} d\eta \end{aligned} \quad (6a,b,c)$$

По-нататък, след интегриране на лявата страна на (1) от 0 до δ и замествайки $f(x,t)$ с $f_a(x,t)$ се получава, че

$$\begin{aligned} \frac{1}{n+1} \frac{d\delta}{dt} &= D_\beta \delta^{1-\beta} \Phi_1(n, \beta, \eta) \\ \Phi_1(n, \beta) &= \int_0^1 \frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} d\eta \end{aligned} \quad (7a,b)$$

Тъй като $\Phi_1(n, \beta, \eta)$ не зависи от времето и началното условие за фронта е $\delta(t=0)=0$, се получава следното диференциално уравнение

$$\begin{aligned} \frac{d\delta^\beta}{dt} &= D_\beta \beta ((n+1) \Phi_1(n, \beta)) \\ \delta_1 &= (D_\beta t)^\frac{1}{\beta} \left[\beta (n+1) \Phi_1(n, \beta) \right]^\frac{1}{\beta} \end{aligned} \quad (8a,b)$$

В (8b) δ_1 означава дълбочината на проникване определена чрез метода на просто интегриране. Поради факта, че $1 < \beta < 2$, следва, че при $\beta \rightarrow 2$ получаване $\delta \rightarrow \sqrt{Dt}$ защото по този начин $D_\beta [m^\beta/s] \rightarrow D [m^2/s]$. В същото време численият коефициент е $\beta((n+1)\Phi(n, \beta)) \rightarrow 2n(n+1)$, т.е. интегрално решение [35] на линейно дифузионно уравнение.

3.2.2. Метод с двойно интегриране (DIM)

С помощта на (5) и след промяна на променливите в дясната част на (1) се получава

$$\int_0^\delta \int_x^\delta \frac{\partial^\beta f_a(x)}{\partial x^\beta} dx dx = D_\beta \delta^{2-\beta} \int_0^1 \int_\eta^1 \frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} d\eta d\eta \quad (9)$$

В резултат на това, уравнението за фронта на решението е

$$\begin{aligned} \frac{1}{(n+1)(n+2)} \frac{d\delta^2}{dt} &= D_\beta \delta^{2-\beta} \Phi_2, \\ \Phi_2 &= \int_0^1 \int_\eta^1 \frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} d\eta d\eta \end{aligned} \quad (10a,b)$$

Сменяйки променливата като $\delta^2 = y$, решението на (10a) е $y^{\beta/2} = A(\beta/2)t$, а дълбочината на проникване δ_2 определена чрез DIM е

$$\delta_2 = (D_\beta t)^\frac{1}{\beta} \left[\frac{\beta}{2} (n+1)(n+2) \Phi_2 \right]^\frac{1}{\beta} \quad (15)$$

Когато $\beta \rightarrow 2$ се получава, че $\delta_2 \rightarrow \sqrt{Dt}$, защото $D_\beta [m^\beta/s] \rightarrow D [m^2/s]$. Освен това, коефициентът $(\beta/2)((n+1)(n+2)\Phi_2(n, \beta)) \rightarrow (n+1)(n+2)$, защото $\Phi_2(\beta=2)=1$ и тогава получаваме решението на нормалното дифузионно уравнение получено чрез двойно интегриране [41,42,47].

3.3. Приближен профил (решение)

Следователно, приближените решения са

• Просто интегриране (NBIM)

$$f_a^1(\xi) = \left(1 - \frac{\xi}{N_1(n, \beta)} \right)^n, \quad \xi = \frac{x}{(D_\beta t)^{1/\beta}},$$

$$N_1(n, \beta) = [\beta(n+1)\Phi_1(n, \beta)]^{1/\beta} \quad (12a,b)$$

• Двойно интегриране (DIM)

$$f_a^2(x, t) = \left(1 - \frac{\xi}{N_2(n, \beta)} \right)^n, \quad \xi = \frac{x}{(D_\beta t)^{1/\beta}},$$

$$N_2(n, \beta) = \left[\frac{\beta}{2} (n+1)(n+2) \Phi_2(n, \beta) \right]^{1/\beta} \quad (13a,b)$$

Приближените решения дефинират директно, по естествен път, не-Болцманова променлива $\xi = x/(D_\beta t)^{1/\beta}$. Позицията на фронта

се дефинира чрез $f_a(\xi_F) = 0$ за $\xi_{F_1} = N_1(n, \beta)$ или $\xi_{F_2} = N_2(n, \beta)$, където ξ_F съответства на δ . Фронтът се движи със скорост $t^{1/\beta}$ и неговата дължина е пропорционална на дифузионния характеристичен мащаб за дължина $(D_\beta t)^{1/\beta}$, с числен коефициент дефиниран от $N_1(n, \beta)$ или $N_2(n, \beta)$.

3.4. Определяне на $\partial^\beta F_a(\eta)/\partial \eta_\beta$ и $\Phi(n, \beta)$

Определянето на $\Phi(n, \beta)$ (ние изпускаме индексите 1 и 2 за простота) ще бъде извършено чрез развитие на $F_a(\eta) = (1-\eta)^n$ като сходящ ред (представен чрез крайна сума)

$$F_a(\eta) = (1-\eta)^n \approx \sum_{j=0}^K m_j \eta^j, \quad m_j = \frac{F^{(j)}(0)}{\Gamma(j+1)} \quad (14a,b)$$

След това, дробното диференциране (с RL производна) от (14a) ([43]–стр. 70) води до

$$\begin{aligned} \frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta_\beta} &= {}_{RL}D_x^\beta \approx \sum_{j=0}^K \frac{m_j}{\Gamma(j-\beta+1)} \eta^{j-\beta} = \\ &= \eta^{-\beta} \sum_{j=0}^K \frac{m_j}{\Gamma(j-\beta+1)} \eta^j \end{aligned} \quad (15a,b)$$

В този смисъл, ако дробната производна е от тип Caputo, то тогава операцията представена чрез (15) води до

$$\frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta_\beta} = {}_C D_x^\beta \approx \sum_{j=1}^K \frac{m_j}{\Gamma(j-\beta+1)} \eta^{j-\beta} \quad (16)$$

Основната разлика с (15a) е първият член.

3.4.1. Просто (еднократно) интегриране

Интегрирането на реда (15a) от 0 до 1 води до апроксимацията на $\Phi_1(n, \beta)$, а именно

$$\Phi_1(n, \beta) \approx \int_0^1 \sum_{j=0}^K \frac{m_j}{\Gamma(j-\beta+1)} \eta^{j-\beta} d\eta = \sum_{j=0}^K \frac{m_j}{\Gamma(2+j-\beta)} \quad (17)$$

Следователно, дълбочината на проникване е

$${}_{RL}\delta_1 = (Dt)^{\frac{1}{\beta}} \left[\beta(n+1) \sum_{j=0}^K \frac{m_j}{\Gamma(2+j-\beta)} \right]^{\frac{1}{\beta}} \quad (18a)$$

или

$${}_C\delta_1 = (Dt)^{\frac{1}{\beta}} \left[\beta(n+1) \sum_{j=1}^K \frac{m_j}{\Gamma(2+j-\beta)} \right]^{\frac{1}{\beta}} \quad (18b)$$

3.4.2. Двойно интегриране

С двойно интегриране резултатът е

$${}_{RL}\Phi_2(n, \beta) \approx \sum_{j=0}^K m_j \left(\frac{1}{\Gamma(2+j-\beta)} - \frac{1}{\Gamma(3+j-\beta)} \right) \quad (19)$$

4. ОЦЕНКА НА ГРЕШКАТА И ОПТИМАЛНИ ЕКСПОНЕНТИ

4.1. Функция на остатъците и ограничения върху експонентата n на границите на дифузионния слой

Функцията на грешката на модела (1) е

$$\varphi(f_a(x, t)) = \frac{\partial f_a(x, t)}{\partial t} - D_\beta \frac{\partial^\beta f_a(x, t)}{\partial x^\beta} \quad (20)$$

С апроксимиращата функция

$$f_a = (1-x/\delta)^n \Rightarrow F_a(\eta) \quad \text{изразът (20) приема}$$

$$\varphi(f_a(n, \beta, \eta)) = n(1-\eta)^{n-1} \frac{\eta}{\delta} \frac{d\delta}{dt} - D_\beta \left(\frac{1}{\delta} \right)^\beta \frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} \quad (21)$$

За $x=0$ ($\eta=0$), с помощта на (15) или (16), ние получаваме $\varphi(f_a(0, t)) = 0$ за всяко n и. Освен това, е необходима оценка за поведението на приближеното решение в близост до фронта,

Глава 2.5 Нестационарна супердифузия с постоянен дифузионен коефициент

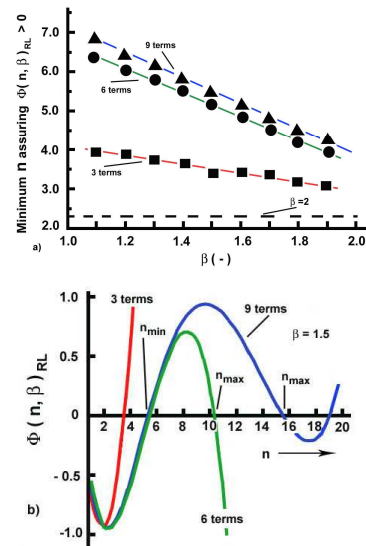
т.е. при $x \rightarrow \delta$. От дефиницията на производната на Caputo (2b), където с използвания приближен профил (7) вътре в дробния интеграл имаме $d^2 f_a(x, t)/dx^2 = n(n-1)(1-x/\delta)^{n-2}$. С цел да се изпълнят граничните условия на Гудман дифузионното уравнение се изпълнява при $n > 2$. Същото ограничение следва от изискването за положително решение изисква $n > \beta$, а при $1 < \beta < 2$ това просто условие означава, че трябва да имаме $n > 2$.

4.2. Брой на членовете в ограничените редове апроксимиращи ${}_{RL}\Phi(n, \beta)$ и минимални стойности на експонентата n

Тъй като функцията на дълбочината на проникване на дифузанта включва членът $\Phi(n, \beta)$, то резонните въпроси са:

- Каква е минималната стойност на n , при дадена стойност на β , която осигурява $\Phi(n, \beta) > 1$ защото стойността на δ е положителна по природа (since the value of δ is positive by nature) ?
- Освен това, колко члена от реда апроксимиращ $\Phi(n, \beta)$ трябва да се използват? Отговорите на тези въпроси са представени Фиг. 1a при използване на ${}_{RL}\Phi_1(n, \beta)$. Представени графики сочат две основни неща:
 - Броят на членовете използвани за апроксимация на $\Phi(n, \beta)$ е важен, но този ефект може да се пренебрегне, ако апроксимацията използва повече от 9 члена.
 - Минималната стойност на n намалява с увеличаване на дробният порядък β . По-

нататък, ние се концентрираме върху факта, че минималните стойности n , осигуряващи положителни стойности на $\Phi_1(n, \beta)$, са дефинирани между $n_{\min}$ и $n_{\max}$ (виж Фиг. 1b).



Фиг.1. Минимални стойности на n осигуряващи $\Phi(n, \beta) > 1$ (a) и ограничения ред като функция на n (b)

4.3. Оптимални експоненти

Прилагайки критерият на Langford [48], за интегралния метод, е необходимо да се изпълни условието

$$E_L(n, \beta, t) = \int_0^\delta \left[\frac{\partial f_a}{\partial t} - D_\beta \frac{\partial^\beta f_a}{\partial x^\beta} \right]^2 dx \rightarrow \min \quad (21)$$

С използване на безизмерната променлива η мярката за грешката $E_L(n, \beta, t)$ (21) е

$$E_L(n, \beta, t) = \frac{1}{\delta^{2\beta}} \int_0^1 \left[n(1-\eta)^{n-1} \eta \delta^{\beta-1} \frac{d\delta}{dt} - D_\beta \frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} \right]^2 d\eta \quad (22)$$

С цел яснота на изложението, ние започваме с резултатите на метода с просто

Глава 2.5 Нестационарна супердифузия с постоянен дифузионен коефициент

интегриране. В този случай производението $\delta_1^{\beta-1}(d\delta_1/dt) = D_\beta [\beta(n+1)\Phi_1(n, \beta)]^\beta$ не зависи от времето и $\delta^{2\beta} = D_\beta^2 t^2 [\beta(n+1)\Phi(n, \beta)]^2$. Още повече, от (15) и (19) ние можем да представим $\partial^\beta F_a(\eta)/\partial \eta^\beta$ като ограничен ред, което от своя страна позволява функцията на квадратичната грешка $E_L(n, \beta, t)$ да се представи като $E_{L_1}(n, \beta, t) \approx e_{L_1}(n, \beta) \delta^{-2\beta} = e_{L_1}(n, \beta)/t^2$. В този случай новата суб-функция $e_{L_1}(n, \beta)$ на квадратичната грешка се дефинира като

$$e_{L_1}(n, \beta) = \frac{1}{[\beta(n+1)\Phi(n, \beta)]^2} \times \int_0^1 \left[n(1-\eta)^{n-1} \eta [\beta(n+1)\Phi(n, \beta)]^\beta - \frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} \right]^2 d\eta \quad (23a)$$

Алтернативно, при използване на метода на двойно интегриране суб-функцията на квадратичната грешка $e_{L_2}(n, \beta)$ е

$$e_{L_1}(n, \beta) = \frac{1}{[(\beta/2)(n+1)(n+2)\Phi_2(n, \beta)]^2} \times \int_0^1 \left[n(1-\eta)^{n-1} \eta [(\beta/2)(n+1)(n+2)\Phi_2(n, \beta)]^\beta - \frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} \right]^2 d\eta \quad (23b)$$

За методът на просто интегриране, оптималните експоненти са ограничени между кривите представящи апроксимации чрез 3 и 6 члена, съответно, както е показано на Фиг.1а, докато за DIM те са разположени над границата начертана от апроксимацията използваща 9 члена от реда. В първият случай, ние трябва да отчитаме факта, че численият коефициент, който

трябва да се оптимизира производението $\beta(n+1)\Phi_1(n, \beta)$, а не само $\Phi_1(n, \beta)$.

Таблица 1. Оптимални експоненти на апроксимацията профил определени чрез използване на 9 члена от $\Phi(n, \beta)$

β	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	1.7	1.8	1.9
HBIM									
n_{opt}	6.8	6.4	6.0	5.6	5.3	5.0	4.7	4.4	4.0
	23	90	82	91	81	76	08	11	03
DIM									
n_{opt}	9.6	9.4	9.1	8.4	8.5	8.3	8.1	7.7	7.8
	97	14	25	1	75	15	01	65	50

5. ЧИСЛЕНИ ЕКСПЕРИМЕНТИ

5.1. Точни решения: Анализ и проблеми със симулацията

Точното решение на Huang and Liu [34] на нестационарното уравнение (1) (с производни на Caputo) представено чрез автомоделната променлива $\xi = x/(Dt)^{1/\beta}$ е:

$$u_{HL}(x, t) = u(\xi) = \frac{L_\beta^{2-\beta}(x)}{L_\beta^{2-\beta}(x=0)} = \frac{G_{1,\beta}(x, t)}{L_\beta^{2-\beta}(x=0)},$$

$$L_\beta^{2-\beta}(x=0) = \frac{1}{\pi\beta} \Gamma\left(\frac{1}{\beta}\right) \cos\left[\frac{(2-\beta)\pi}{2\beta}\right] \quad (24a,b)$$

$$G_{1,\beta}(x, t) = \frac{1}{(D_\beta t)^{1/\beta}} L_\beta^{2-\beta}\left(-\frac{x}{(D_\beta t)^{1/\beta}}\right), \quad 1 < \beta \leq 2$$

(31)

$$L_\beta^{2-\beta}(x) = \frac{1}{\pi x} \sum_{k=1}^{\infty} (-x)^k \frac{\Gamma(1+k/\beta)}{n!} \sin\left[\frac{k\pi}{\beta}(1-\beta)\right],$$

$x > 0$

(25)

Резултатите са много чувствителни по отношение на броя членове използвани при апроксимациите (виж по-нататък Фиг. 2b,c,d и Фиг.3a,c) и съществува възможност за взривно поведение (blow-ups). За да се избегне такова

поведение на точните решения при числените симулации на точните решения **са използвани редове с 500 члена.**

5.2. Сравнение на приближените и точните решения (Benchmarking to the exact solutions)

Сравнението на приближените решения с точните са представени графично на Фиг. 2 и Фиг.3. Съществуват три диапазона (three sub-ranges) на вариации на β , при различни точности на апроксимация, а именно:

- За интервала $1.4 < \beta < 1.7$ (виж фиг. 2) приближението решения имат задоволителна точност и максимумите на абсолютните стойности на локалната грешка (the maxima of the point-wise errors (PWE)) не надвишават 0.04 . Този резултат е в съгласие с точността (2 – 3%) на интегралните решения на дифузионни уравнения от цял порядък [37, 38,] и такива с дробни по време производни [41, 42] .
- Обаче, в интервала $1.1 < \beta < 1.3$ (виж фиг.3) и за $1.7 < \beta < 1.99$ (виж фиг.4) решенията не са в близост до точните, в широк диапазон на промяна ξ . Приближените профили плавно се сходят до нула, като по този начин ясно означават точките дефиниращи фронта на решенията (the points of the penetration depths), докато точните решения се стремят към взривно поведение. Поради тази причина, с коректна оценка на точността на приближените решения е разумно да се разглеждат зоните с малки стойности на ξ когато $1.1 < \beta < 1.3$, а по-точно при $\text{for } \xi \leq 1$. В другата подобласт, когато $1.7 < \beta < 1.99$ добра апроксимация, с приемлива грешка, може да се получи при $\xi > 2$.

- Отчитайки факта, че $\xi = x(D_{\beta}t)^{-1/\beta}$, малките стойности на ξ може да се разглеждат като случаи на големи времена за фиксирана стойност на x и обратното, къси дистанции x и умерени времена.

ИЗВОДИ

Получени са приближени аналитични решения на нестационарно дифузионно уравнение с дробна по пространство производна на Riemann–Liouville и полубезкрайна област, в случая на задача на Дирихле. Използван е интегрален метод с две основни техники на интегриране *метод с просто (еднократно) интегриране (HBIM)* и *метод с двойно интегриране (DIM)*, и концепцията за крайна дълбочина на проникване на дифузанта.

Използван е приближен параболичен профил с недефинирана експонента, който позволява апроксимация чрез сходящ ред по отношение на безизмерната пространствена координата. Тази апроксимация дава възможност да се приложи дробното диференциране по отношение на пространствената координата. Анализът на този момент позволява да се установи, че при използване на 9 члена на апроксимиращия ред се достига необходимата точност за по-нататъшно развитие на аналитичното решение.

Оптимизационна процедура използваща критерия на Langford позволява да се определят , за фиксирани стойности на β , оптималните стойности на експонентите на апроксимиращия осигуряващи минимума на средноквадратичната

Глава 2.5 Нестационарна супердифузия с постоянен дифузионен коефициент

грешка на апроксимация за зоната на аналогични решения на нормалния дифузионен модел ($\beta = 2$). В границите $1.1 < \beta < 1.3$, дифузионния слой.

Числените тестове, с оптималните приемливи грешки на апроксимация са възможни експоненти, сочат приемлива точност на при $\xi = x(D_\beta t)^{-1/\beta} < 2$, докато при $1.7 < \beta < 1.9$,

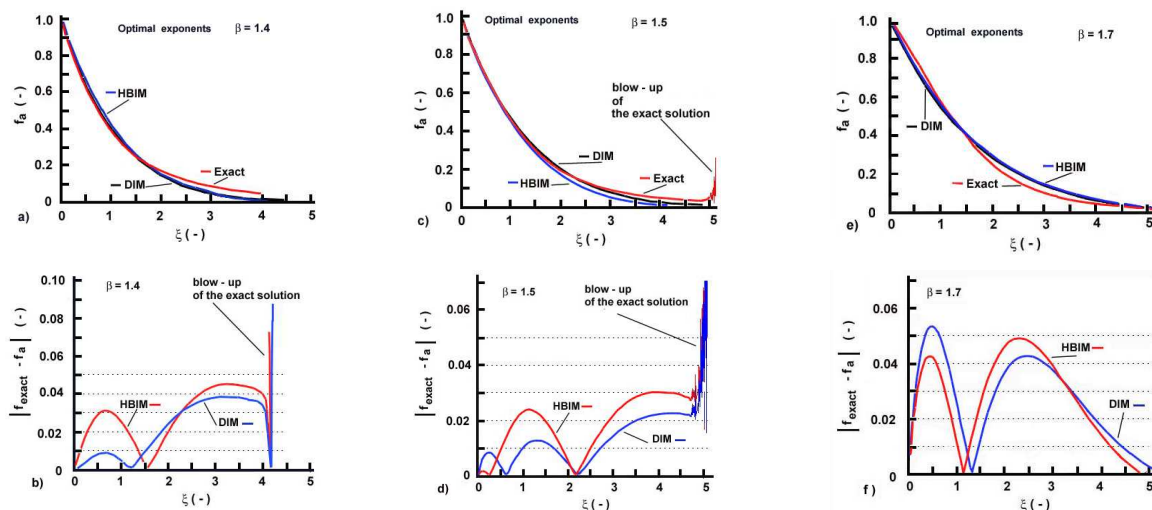


Fig.2. Сравнение на приближените и точни решения (a,c,e) и локалните абсолютни грешки (b,d,f) за $1.4 < \beta < 1.7$

апроксимация в границите $1.4 < \beta < 1.7$, с решения са възможни при $\xi = x(D_\beta t)^{-1/\beta} > 2$ абсолютни точкови грешки сравними с тези при

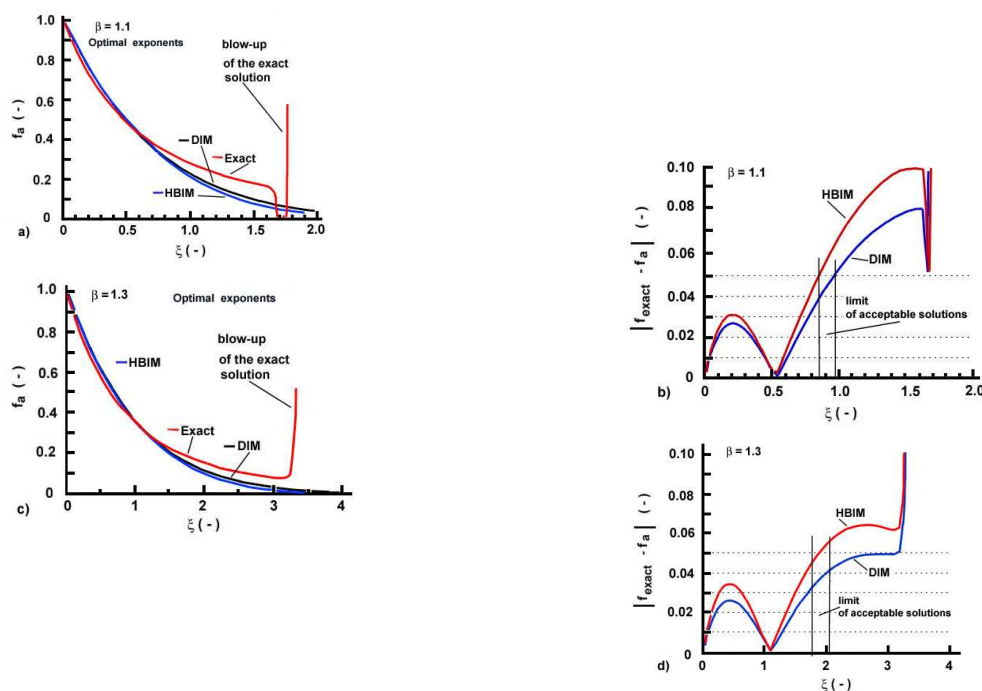


Fig.3. Сравнение на приближените и точни решения (a,c) и локалните абсолютни грешки (b,d) за $1.1 < \beta < 1.3$

Глава 2.5 Нестационарна супердифузия с постоянен дифузионен коефициент

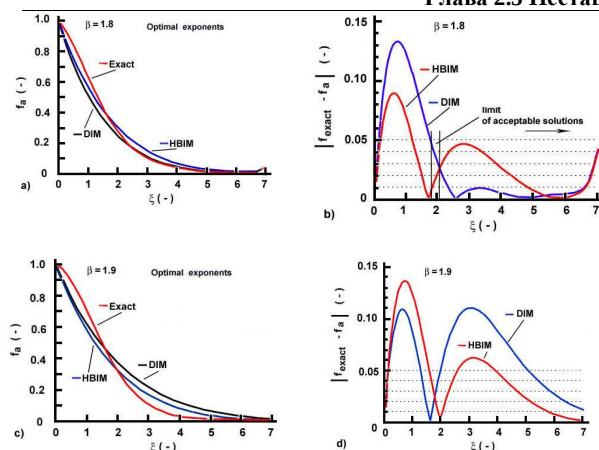


Fig.4. Сравнение на приближените и точни решения (a,c) и локалните абсолютни грешки (b,d) за $1.7 < \beta < 1.9$

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Trujillo, J., Fractional models: Sub and super-diffusive, and undifferentiable solutions, In: B. H. V.Topping, G. Montero, and R.Montenegro (Eds), *Innovation in Engineering Computational Technology*, Sax-Coburg Publ., Stirling, UK, 2006, pp. 371–402.
- [2] Nigmatullin, R.R., The realization of the generalized transfer equation in a medium with fractal geometry, *Physica Status Solidi (B) Basic Research.*, 133 (1986), 1, 425–430.
- [3] Bakunin ,O.G., Description of the Anomalous Diffusion of Fast Electrons by a Kinetic Equation with a Fractional Spatial Derivative, *Plasma Physics Reports*, Vol. 30, No. 4, 2004, pp. 338–342.
- [4] Bakunin O.G., Diffusion Equations and Turbulent Transport, *Plasma Physics Reports*, (2003),11, pp. 955–970.
- [5] Luchko, Yu, Srivastava,H.M., The exact solution of certain differential equations of fractional order by using operational calculus, *Comp. Math. Appl.*, 29 (1995),8, 73-85.
- [6] He,J-H., Approximate analytical solution for seepage flow with fractional derivatives in porous media, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* , 167 (1998),1-2, 57-68.
- [7] Molliq, R.Y., Noorani, M. S. M., Hashim,I., Variational Iteration Method for Fractional Heat-and Wave-Like Equations, *Nonlinear Anal., Real World Appl.*, 10 (2009), 3, pp. 1854–1869..
- [8] Nakagawa, J. ,Sakamoto,K.,Yamamoto, M., Overview to mathematical analysis for fractional diffusion equations–new mathematical aspects motivated by industrial collaboration, *J. Math-for-Indust.* , 2(2010A-10) 99-108 .
- [9] Das, S., Gupta, P.K., Ghosh, P., An approximate analytical solution of Nonlinear Fractional Diffusion Equation, *Appl. Math.Model.*,35 (2011) , 8, 4071-4076.

- [10] Wu, G-C: Variational iteration method for solving the time-fractional diffusion equations in porous medium. *Chin. Phys. B.*, 21, (2012a), 22, Article ID 120504; DOI: 10.1088/1674-1056/21/12/120504
- [11] G.-C. Wu, Applications of the Variational Iteration Method to Fractional Diffusion : Local versus Nonlocal Ones, *Int. Rev. Chem.Eng.*, 4 (2012b),5,505-510.
- [12] G.C. Wu, D. Baleanu, Z.G. Deng, S.D. Zeng, Lattice fractional diffusion equation in terms of a Riesz-Caputo difference, *Physica A*, 438 (2015) 335-339.
- [13] Hashemi, M. S.; Baleanu, D.; Parto-Haghighi, M., A., Lie group approach to solve the fractional Poisson equation, *Romanian J.f Phys.* , 60 (2015), 9-10, pp:1289-1297.
- [14] Liu F, Shen S, Anh V, Turner I. Analysis of a discrete non-Markovian random walk approximation for the time fractional diffusion equation. *ANZIAM J.* , 46 (2004), E, pp.488–504.
- [15] Liu F, Zhuang P, Anh, V, Turner I, Burrage K. Stability and convergence of the difference methods for the space-time fractional advection-diffusion equation. *Appl Math Comput.* , 191 (2007), 1, pp. 12–20.
- [16] Zhuang P, Liu F. Implicit difference approximation for the time fractional diffusion equation. *J Appl Math Comput.* , 22 (2006),3, pp. 87–99.
- [17] Meerschaert MM, Tadjeran C. Finite difference approximations for two-sided space-fractional partial differential equations. *Appl Numer Math.* ,56 (2006),1,pp.80–90.
- [18] Basu T S, Wang H. A fast second-order finite difference method for space-fractional diffusion equations. *Int J Numer Anal Mod.*,9 (2012),5, pp. 658–666.
- [19] Akgul, A.; Inc, M.; Karatas, E. ; Baleanu, D., Numerical solutions of fractional differential equations of Lane-Emden type by an accurate technique, *Adv Diff. Eqs*, Article Number: 220 Published: JUL 16 2015; DOI: 10.1186/s13662-015-0558-8
- [20] Bhrawy, A. H.; Doha, E. H.; Baleanu, D., Hafez, R.M., A highly accurate Jacobi collocation algorithm for systems of high-order linear differential-difference equations with mixed initial conditions ,*Math. Meth. Appl. Sci.*, 38 (2015),14, pp. 3022–3032. doi: 10.1002/mma.3277.
- [21] Podlubny, I, *Fractional Differential Equations*, Academic Press, New York, 1999
- [22] Benson.D.A., The fractional order governing equations of Levy motions , *Water Resour.Res.*, 36 (2000),6, pp.1413-1423.
- [23] Shlesinger, M.F., West, B.J., Klafter, J., Levy dynamics of enhanced diffusion: Application to turbulence, *Phys. Rev. Lett.*, 38 (1987),11, pp.1100-1103.

Глава 2.5 Нестационарна супердифузия с постоянен дифузионен коефициент

- [24] Ervin, V.J., Heur, N., Roop, J., Numerical approximation of a time dependent, nonlinear, spacefractional diffusion equation, *SIAM J. Num. Anal.*, 45 (2008), 2, pp. 572-591.
- [25] Li, C.P., Zhao, Z.G., Chen, Y.Q., Numerical approximation of nonlinear fractional differential equations with subdiffusion and superdiffusion, *Comp. Math. Appl.*, 62 (2011), 3, pp. 855-875.
- [26] Sapora, A., Corneti, P., Carpinteri, A., Diffusion problems on fractional nonlocal media, *Centr. Eur. J. Phys.*, 11 (2013), 10, pp. 1255-1261.
- [27] El-Kady, M., El-Sayed, S.M., Salem, H.S., El-Gendi nodal Galerkin method for solving linear and nonlinear partial fractional space equations, *Int. J. Latest Res. Sci. Technol.*, 2 (2013), 6, pp. 10-17.
- [28] Zheng, Y., Zhao, Z., A fully discrete Galerkin method for a nonlinear space-fractional diffusion equation, *math. Problems in Engineering*, (2011) Article 171620, 20 pages,
- [29] Saadatmandi, A., Deghan, M., A tau approach for solution of the space fractional diffusion equation, *Comp. Math. Appl.*, 62 (2011), 3, pp. 1135-1142.
- [30] Nie, N., Huang, J., Wang, W., Tang, Y., Solving spatial-fractional partial differential diffusion equations by spectral method., *J. Stat. Comp. Sim.*, 84 (2014), 6, pp. 1173-1189.
- [31] Ray, S.S., A new approach for the application of Adomian decomposition method for the solution of fractional space diffusion equation with insulated ends, *Appl. Math. Model.* 2002(2008), 2, pp. 544-549.
- [32] Ray, S.S., Analytical solution for the space fractional diffusion equation by two-step Adomian decomposition method, *Comp. Nonlinear Sci. Num. Simul.*, 14 (2009), 4, pp. 1295-1306.
- [33] Ray, S.S., Chaudhuri, Bera, R.K., Application of modified decomposition method for the analytical solution of space fractional diffusion equation, *Appl. Math. Comput.*, 196 (2008), 1, pp. 294-302.
- [34] Huang, F., Liu, F., The space-time fractional diffusion equation with Caputo derivatives, *J. Appl. Math & Computing*, 19 (2005), 1-2, pp. 179-190.
- [35] Huang, F., Liu, F., The fundamental solution of the space-time fractional advection-diffusion equation, *J. Appl. Math & Computing*, 19 (2005), 1-2, pp. 339-350.
- [36] Aguilar, J.F.G., Hernandez, M.M., Space-time fractional diffusion-advection equation with Caputo derivative, *Abstract and Applied Analysis*, 2014, Article ID 283019, 8 pages. Doi: 10.1155/2014/283019
- [37] Goodman, T.R., Application of Integral Methods to Transient Nonlinear Heat Transfer, In: T. F. Irvine and J. P. Hartnett (Eds.), *Advances in Heat Transfer*, 1 (1964), Academic Press, San Diego, CA, pp. 51-122.
- [38] Hristov, J., The heat-balance integral method by a parabolic profile with unspecified exponent: Analysis and benchmark exercises. *Therm. Sci.*, 13 (2009), 2, 22-48.
- [39] Hristov, J., Heat-Balance Integral to Fractional (Half-Time) Heat Diffusion Sub-Model, *Therm.*, 14 (2010), 2, 291-316.
- [40] Hristov, J., Approximate Solutions to Fractional Subdiffusion Equations: The heat-balance integral method, *Europ. Phys. J.-ST*, 193 (2011), 1, 229-243.
- [41] Hristov, J., Double Integral-Balance Method to the Fractional Subdiffusion Equation: Approximate solutions, optimization problems to be resolved and numerical simulations, *J. Vibration and Control*, in press; DOI: 10.1177/1077546315622773
- [42] Hristov, J., Approximate solutions to time-fractional models by integral balance approach, In: C. Cattani, H.M. Srivastava, Xia-Jun Yang (Eds.), *Fractals and Fractional Dynamics*, De Gruyter Open, 2015, pp. 78-109.
- [43] Oldham, K.B., Spanier, J., *The fractional Calculus*, Academic Press, New York, USA, 1974.
- [44] Gradshteyn, I.S., Ryzhik, I.M., *Table of Integrals, Series, and Products*. Edited by A. Jeffrey and D. Zwillinger. Academic Press, New York, 7th edition, 2007.
- [45] Ozcag, E., Ege, I., Gurcay, H., Jolevska-Tuneska, B., On partial derivatives of the incomplete beta function, *Appl. Math. Lett.*, 21 (2008), 7, pp. 675-681
- [46] DiDonnato, A.R., Jarnagin, M.P., A method for computing the incomplete beta function ratio for half-integer values of the parameter a and b, *Math. Comp.*, 21 (1967), 100, pp. 652-662.
- [47] Myers, T.G., Optimal exponent heat balance and refined integral methods applied to Stefan problem, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 53 (2010), 5-6, pp. 1119-1127.
- [48] Langford, D., The heat balance integral method, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 16 (1973), 12, pp. 2424-2428.

ГЛАВА 2.6

НЕСТАЦИОНАРНА СУПЕРДИФУЗИЯ СЪС
СТЕПЕНЕН ДИФУЗИОНЕН КОЕФИЦИЕНТ¹

Тази глава представя приближено аналитично решение за задача с начално условие и дробна по пространство производна на Riemann–Liouville. Пространствената корелация на дифузионния коефициент е представена със степенна функция и се дискутира нейното отношение към възможните режими на бърза и бавна пространствена супердифузия. Приближеното решение е представено като функция на нелинейна автомоделна променлива и използва интегрален метод и развитие в ред на апроксимиращ параболичен профил с неизвестна експонента. Зависимостите представящи пространствено и временно развитие на приближеното решение са основни цели на проведенния анализ и са коментирани в двата основни случая: бърза и бавна супердифузия.

1. ВЪВЕДЕНИЕ

1.1. Супердифузионен модел

При описанието на нелинейни дифузионни процеси мащабирането води до фрактални зависимости и нелинейни модели, които от своя страна представляват дробни диференциални уравнения (FDEs) [1,2,3,4] използващи както нелокални дробни производни [5], така и класически локални производни [6]. По-точно, моделирането чрез дробни производни, по време и пространство, използва производни на Riemann-Liouville и Caputo [1-6] със сингулярни ядра, а също и производни с несингулярни (експоненциални) ядра [7-11], дискретен подход [12] и локални дробни производни [13].

¹ Публикувано като: **Hristov J.**, Transient space-fractional diffusion with a power-law superdiffusivity: Approximate integral-balance approach, *Fundamenta Informaticae (IOS Press)*, 151 (2017), 1-4, pp. 371–388; DOI 10.3233/FI-2017-1500, <https://www.iospress.nl/journal/fundamenta-informaticae/>

Получаването на аналитични решения на FDEs е трудно задача [14] и в повечето случаи се използват числени методи [16-26], но и при двата подхода крайните форми на решенията са трудни за инженерен анализ и приложение.

Тази глава разглежда приближено аналитично решение на едномерно пространствено дробно уравнение от порядък $1 < \beta < 2$ със степенен коефициент на дифузия (power-law superdiffusivity) $D_\beta [m^\beta/s]$:

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = D_\beta(x) \frac{\partial^\beta u(x,t)}{\partial x^\beta}, \quad u(x,0) = 0 \quad (1a)$$

$$u(0,t) = 1, \quad u(\infty,t) = 0$$

$$D_\beta(x) = D_{\beta 0} x^\alpha, \quad 0 \leq \alpha \leq \beta, \quad x > 0 \quad (1b)$$

Експонентата α описва нарастващ ($\alpha > 0$) или намаляващ ($\alpha < 0$) пространствен коефициент на супердифузия. Пространствената дробна производна в (1) е лява производна от тип Riemann-Liouville (RL) или Caputo, от порядък β ($1 < \beta < 2$) [27] (виж за дефиниции Глава 2.5)

Общоприетият подход за решаване на (1) е използването на числени методи [28,29,30,31,32,33,34], при сравнително малко аналитични решения [35-40].

1.2. Супердифузионен коефициент $D_\beta(x)$,
физичен смисъл и коректна корелация

1.2.1. Пространствена корелация

Като първи етап на развитие на задачата, нека разгледаме функционалната зависимост $D_\beta(x)$, един проблем важен за физичната адекватност на модела (1b). Коефициентът на

супердифузия $D_\beta(x) = D_{\beta 0} x^\alpha$ е често използван в числени примери демонстриращи различни подходи за решаване на уравнение (1a) [35,39]. Най-често срещания подход е да се представи модела (1b) като $D_\beta(x) = \Gamma(\bullet) x^\alpha$ [35-39], където $\Gamma(\bullet)$ Гама функция. Необходимо да се обърне вниманието на факта, че двете страни на модела (1a) ще имат еднакви размерности, ако коефициентът на супердифузия D_β е с размерност m^β/s . В случай на постоянен коефициент на супердифузия (независим от пространствената координата и времето) изразът (1b) е коректен, но в този случай размерността на $D_{\beta 0}$ трябва да бъде $m^{\beta-\alpha}/s$ за да може двете страни на (1a) да бъдат хомогенни по размерност. Очевидно е, че представянето на $D_{\beta 0}$ като $\Gamma(\bullet)$ [37,41] не съответствува на условието за хомогенност на уравнение (1), защото $\Gamma(\bullet)$ няма размерност. Освен това при $x=0$ имаме $D_\beta(x=0)=0$ и уравнение (1a) дегенерира.

1.2.2. Физически смисъл

Коефициентът $D_\beta(x) = D_{\beta 0} x^\alpha$, с $\alpha > 0$, е основния случай изследван в тази глава и описва дифузия в среда с нарастваща пространствена проницаемост (space-dependent diffusivity). Физически, това е модел на течение в пореста среда (стратифицирани почви или отлагания в депо за отпадъци) от дълбок източник към повърхността, с компактност на слоевете намаляваща в посока на движение на флуида.

В случай на $\alpha < 0$, дифузионният коефициент намалява в дълбочина на порестата среда и този модел съответствува на инфилтрация на флуид в почви с компактност нарастваща с дълбочината.

В тази глава се използват два термина за тези случаи: *бърза супердифузия* (fast spatial superdiffusivity, $\alpha > 0$) и *бавна супердифузия* (slow spatial superdiffusivity, $\alpha < 0$). Причината за използване на термините и изложена по-нататък в текста.

Когато дифузионния коефициент е зависим от концентрацията и представен чрез степенна зависимост $D = D_0 C^m$ съществуват два основни случая [42]: бавна дифузия (slow-diffusion за $m > 0$) и бърза дифузия (fast diffusion за $m < 0$). Следователно, термините използвани тук за описание на пространствено зависима супердифузия са използвани по аналогия. Независимо от това, трябва да се отбележи, че когато се разглежда пространствено-зависим коефициент на супердифузия термините бърз (fast) и бавен (slow) се използват точно в обратния смисъл, както това е обяснено в точка 2.3.2, където се коментира физическата страна на проблема на базата на полученото решение.

Конкретната задача разгледана в тази глава е получаване на приближено аналитично решение чрез интегрален метод [42,43], преди това успешно прилаган за случай на субдифузионни модели [44-46]. Като основен пример е разработена задачата на Дирихле за модела (1) при нулеви начални условия и дробни производни на Riemann-Liouville.

2. Задача на Дирихле (бърза пространствена супердифузия)

2.1. Интегрален подход

Да разгледаме модела (1а) с начални и гранични условия на задачата на Дирихле

$$u(x, 0) = 0, u(0, t) = 1, u(\infty, t) = 0, t > 0 \quad (2a, b, c)$$

Интегралният подход [42-48] използва принцип на крайна дълбочина на проникване на дифузанта $\delta(t)$ дефинираща рязък фронт на разпространение на решението и замества граничното условие $u(\infty, t) = 0$ с две нови

$$u(0) = 1, u(\delta) = \frac{\partial}{\partial x} u(\delta) = 0 \quad (3a, b, c)$$

2.2. Апроксимиращ профил и трансформация на пространствените променливи

Апроксимиращият профил е параболична функция с недефинирана експонента [43-46]

$$u_a(x) = \left(1 - \frac{x}{\delta}\right)^n, \quad 0 \leq x \leq \delta, \quad n > 0 \quad (4)$$

Профилът изпълнява граничните условия (3a, b, c), като резкият фронт формира две зони: $u_a(x) > 0$ за $x < \delta$ и $u_a(x) = 0$ за $x \geq \delta$. Решението използващо профила (4) налага условието за положителна, но зависи от стойността на дробния порядък β , експонента $n > 0$, което означава, че оптималната експонента $n = n(\beta) > 0$ не е цяло число, като правило [47, 48, 50].

За коректна пресмятане на $\partial^\beta u_a(x)/x^\beta$ е необходимо смяна на пространствената променлива като $\eta = x/\delta$, където $0 \leq \eta \leq 1$. Следователно, апроксимиращата функция се

трансформира като $u_a(x) \Rightarrow F_a(\eta) = (1 - \eta)^n$ и след смяната $x \rightarrow \eta$ дробната пространствена производна от апроксимиращата функция приема вида:

$$\frac{\partial^\beta u_a(x)}{\partial x^\beta} = \left(\frac{1}{\delta}\right)^\beta \frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} \quad (5)$$

По нататък, дясната страна на (1а) със *степенен дифузионен коефициент* $D_\beta(x) = D_{\beta 0} x^\alpha \Rightarrow D_\beta(\eta) = D_{\beta 0} \eta^\alpha \delta^\alpha$ може да се представи като

$$D_{\beta 0} x^\alpha \frac{1}{\delta^\beta} \frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} = D_{\beta 0} \eta^\alpha \delta^{\alpha-\beta} \frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} \quad (6)$$

2.3. Пространствено интегриране и дълбочина на дифузионния слой

2.3.1. Дълбочина на дифузионния слой

В този момент, нека обърнем внимание на интегрирането в дясната страна на (1а) в термини на безразмерната променлива η , използвайки $u_a(x, t)$. С $D_\beta(x) = D_{\beta 0} x^\alpha$ получаваме

$$\int_0^\delta D_\beta(x) \frac{\partial^\beta f_a(x, t)}{\partial x^\beta} dx = \int_0^\delta D_{\beta 0} \eta^\alpha \delta^{\alpha-\beta} \frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} d\eta \quad (7)$$

По-точно, в термини на променливата $\eta = x/\delta$, $x \rightarrow \eta = x/\delta$, ние получаваме

$$\int_0^\delta D_\beta(x) \frac{\partial^\beta f_a(x)}{\partial x^\beta} dx = \delta^{1+\alpha-\beta} \int_0^1 D_{\beta 0} \eta^\alpha \frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} d\eta \quad (8)$$

Последващото интегриране в лявата страна на (1а) от 0 до δ , замествайки $u(x, t)$ с $u_a(x, t)$, води до

$$\frac{d}{dt} \int_0^{\delta} u_a(x,t) dx = \frac{d}{dt} \int_0^{\delta} \left(1 - \frac{x}{\delta}\right)^n dx = \frac{1}{n+1} \frac{d\delta}{dt} \quad (9)$$

С $D_{\beta}(x) = D_{\beta 0} x^{\alpha}$ и (8) се получава

$$\frac{1}{n+1} \frac{d\delta}{dt} = D_{\beta 0} \delta^{1+\alpha-\beta} \Phi_1(n, \alpha, \beta) \quad (9)$$

$$\Phi_1(n, \alpha, \beta) = \int_0^1 \eta^{\alpha} \frac{\partial^{\beta} F_a(\eta)}{\partial \eta^{\beta}} d\eta \quad (10)$$

Понеже $\Phi_1(n, \alpha, \beta)$ не зависи от времето, то тогава

$$\frac{1}{(\beta-\alpha)} \frac{d\delta^{\beta-\alpha}}{dt} = D_{\beta 0} ((n+1)\Phi_1(n, \alpha, \beta)) \quad (11a)$$

$$\delta_p(t) = (D_{\beta 0} t)^{\frac{1}{\beta-\alpha}} [(\beta-\alpha)(n+1)\Phi_1(n, \alpha, \beta)]^{\frac{1}{\beta-\alpha}} \quad (11b)$$

В уравнение (11b), символът $\delta_p(t)$ с индекс „p” съответствува на случай със степенна зависимост на $D_{\beta}(x)$. Освен това, за $\alpha=0$ ние получаваме $\delta_p \equiv (D_{\beta 0} t)^{1/\beta}$, както в случаят разгледан в [48] (Глава 2.5). Тъй като $1 < \beta < 2$, когато $\beta \rightarrow 2$ ние получаваме $\delta_p \rightarrow (D_{\beta 0} t)^{1/(2-\alpha)}$. За $\alpha=0$ и $\beta \rightarrow 2$ се получава $\delta_p \rightarrow \sqrt{Dt}$ $D_{\beta 0} = D_{\beta} [m^{\beta}/s] \rightarrow D [m^2/s]$, т.е. решението на класическото дифузионно уравнение чрез метода на интегрален баланс [42,43].

2.3.2. Скорост на фронта и ограничения върху експонентата α

2.3.2.1. Бърза супердифузия

Важно е да се отбележи, че резултатът (16b) ясно дефинира условието $\beta > \alpha$, защото физиката на процеса изисква *нарастваща във*

времето дебелина на дифузионния слой (growing in time penetration depth) $\delta(t)$, което налага условието $1/(\beta-\alpha) > 0$. Ако за фиксирана стойност на β , разгледаме случая на нарастваща експонентата α , то тогава $1/(\beta-\alpha)$ също ще расте и следователно ще имаме бързо развитие на фронта във времето (*fast propagation in time*). В обратния случай, за намаляващи стойности на α , експонентата $1/(\beta-\alpha)$ ще намалява и дифузионния процес се забавя. По-точно, бързата супердифузия съответствува на нарастващи стойности на α в границите $0 \leq \alpha \leq 1$

В допълнение, важно е да се дефинират ограниченията върху α и β , разглеждайки скоростта на разпространение на $\delta(t)$. Скоростта на $\delta(t)$ е пропорционална на $d\delta/dt \propto (1/(\beta-\alpha)) t^{\left(\frac{1+\alpha-\beta}{\beta-\alpha}\right)}$ и следователно, условието $1+\alpha-\beta > 0$, заедно с $\beta > \alpha$, осигуряват нарастваща във времето скорост на разпространение на фронта. По-точно, това означава, че $\alpha > \beta-1$, т.е. $0 < \alpha < 1$. Ако $\beta=1.1$, като пример, тогава положителното нарастване на фронта изисква $0.1 < \alpha < 1$, или пък за случая когато $\beta=1.5$, условието е $0.5 < \alpha < 1$.

В обратния случай $1+\alpha-\beta < 0$, фронтът ще се развива с намаляваща във времето скорост. По-точно, условието налагащо ограничение на α , в случай на намаляваща скорост, е $\alpha < \beta-1$. В случаите, които бяха коментирани преди малко, ако $\beta=1.1$ и $\beta=1.5$, то намаляваща скорост съществува при $\alpha < 0.1$ и $\alpha < 0.5$, съответно. По-

нататък, за $\alpha = 0$ (постоянен коефициент на супердифузия) скоростта на фронта е $d\delta/dt \propto (1/\beta)t^{(1-\beta)/\beta}$. Следователно отношението $(1-\beta)/\beta$ винаги ще бъде отрицателно и фронта ще се разпространява със скорост намаляваща във времето.

За случая, когато $\alpha = \beta - 1$, фронтът се разпространява линейно във времето $\delta_p(t) = (D_{\beta 0}t)(n+1)\Phi_1(n, \alpha, \beta)$ и с постоянна скорост $d\delta/dt = D_{\beta 0}(n+1)\Phi_1(n, \alpha, \beta)$. За $\beta = \alpha$ получаваме $\delta = 0$ и взривна скорост на разпространение (a blow-up of the speed), но такава ситуация е невъзможна, защото по-горе дефинираните ограничения изискват $0 \leq \alpha \leq 1$ и $1 < \beta < 2$.

Изследването по-нататък в тази глава се ограничава за случая, когато $0 \leq \alpha \leq 1$, с цел да се изследва в пълнота задържащия фактор (the retardation factor) на дробният порядък β . Случаите, когато $1 < \alpha < \beta$, а също и при $\alpha < 0$ са извън това изследване.

2.3.2.2. Бавна супердифузия

Полученият израз (16b) за дълбочината на проникване, без загуба на общност, за $\alpha < 0$, но при $|\alpha| < 1$, с цел да се опише ситуацията на бавна супердифузия, има следната форма

$$\delta_p(t) = (D_{\beta 0}t)^{\frac{1}{\beta+\alpha}} [(\beta+\alpha)(n+1)\Phi_1(n, \alpha, \beta)]^{\frac{1}{\beta+\alpha}} \quad (12)$$

Ако за дадена стойност на β , абсолютната стойност на α нараства, то тогава експонентата

$1/(\beta+\alpha)$ намалява и дифузионния процес ще се забавя. В обратната ситуация, ако абсолютната стойност на α намалява, то тогава нарастването на времето на δ ще бъде по-бързо. Следователно, бавната супердифузия съответствува на случаи на нарастваща абсолютна стойност на α , но при условие $\alpha < 0$.

В случай на $\alpha = 0$, когато пространственият демпфиращ ефект зависи само от стойността на дробния порядък β ние имаме случай на бавна супердифузия. Взимайки този случай за референтна ситуация, при $\alpha > 0$ (бърза пространствена супердифузия) дифузантът ще прониква по-бързо в средата, в сравнение със случая с $\alpha = 0$. За $\alpha < 0$ (бавна супердифузия) проникването ще бъде по-бавно в сравнение със случая с $\alpha = 0$.

3. Приближени решения и свързани проблеми

След определяне на $\delta(t)$ приближеното решение за случай на бавна пространствена супердифузия е

$$u_{a-p} = \left(1 - \frac{x}{(D_{\beta 0}t)^{\frac{1}{\beta-\alpha}} [(\beta-\alpha)(n+1)\Phi_1(n, \alpha, \beta)]^{\frac{1}{\beta-\alpha}}} \right)^n = \left(1 - \frac{\xi_p}{N_p(n, \alpha, \beta)} \right)^n \quad (13a)$$

$$N_p = [(\beta-\alpha)(n+1)\Phi_1(n, \alpha, \beta)]^{\frac{1}{\beta-\alpha}} \quad (13b)$$

Приближеното решение дефинира по естествен път не-Болцманова променлива $\xi_p = x / (D_{\beta 0}t)^{1/(\beta-\alpha)}$

3.1. Определяне на $\Phi_1(n, \alpha, \beta)$

Определянето (изчисляването) на $\Phi_0(n, \beta)$ и $\Phi_1(n, \alpha, \beta)$ ще бъде направено чрез апроксимация на $F_a(\eta) = (1-\eta)^n$ под формата на степен сходящ се ред (представен като крайна сума) [48,50], а именно

$$F_a(\eta) = (1-\eta)^n \approx \sum_{j=0}^K m_j \eta^j, \quad m_j = \frac{F^{(j)}(0)}{\Gamma(j+1)} \quad (14a,b)$$

В този случай, дробната производна (RL) от (18a) (лит.49–стр.) може да се представи като

$$\begin{aligned} \frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} &= {}_{RL} D_x^\beta \approx \sum_{j=0}^K \frac{m_j}{\Gamma(j-\beta+1)} \eta^{j-\beta} = \\ &= \eta^{-\beta} \sum_{j=0}^K \frac{m_j}{\Gamma(j-\beta+1)} \eta^j \end{aligned} \quad (15a,b)$$

В същият контекст, ако дробната производна е на Caputo, то тогава диференцирането на (18) води до

$$\frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} = {}_C D_x^\beta \approx \sum_{j=1}^K \frac{m_j}{\Gamma(j-\beta+1)} \eta^{j-\beta} \quad (16)$$

като основната разлика е по отношение на първият член на (19a).

Редът (14a) е сходящ [49], което лесно се провери чрез метода на Лайбниц.

Използвайки резултатите апроксимиращи дробната производна, ние можем да интегрираме (14) от 0 до 1, като по този начин получаваме апроксимацията на $\Phi_0(n, \beta)$, а именно

$$\Phi_0(n, \alpha, \beta, \eta) \approx \sum_{j=0}^K \frac{m_j}{\Gamma(2+j-\beta)} \quad (17)$$

$$\Phi_1(n, \alpha, \beta, \eta) = \sum_{j=0}^K \frac{m_j}{(j-\beta+\alpha+1)\Gamma(j-\beta+1)} \quad (18)$$

3.2. Оценка на грешката и ограничения върху експонентата n на границите на дифузионния слой

3.2.1. Ограничения върху експонентата n

Функцията на грешката (residual function) на уравнение (1a), в резултат на замяна на истинската функция с апроксимиращ профил, е:

$$R(u_a(x, t)) = \frac{\partial u_a(x, t)}{\partial t} - D_\beta(x) \frac{\partial^\beta u_a(x, t)}{\partial x^\beta} \quad (19)$$

С $u_a = (1-x/\delta)^n \Rightarrow F_a(\eta)$ получаваме

$$R_1(u_a(x, t)) = n(1-\eta)^{n-1} \frac{\eta}{\delta} \frac{d\delta}{dt} - D_\beta \eta^\alpha \delta^{\alpha-\beta} \frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} \quad (20)$$

За $x=0$ ($\eta=0$), като използване (19 или (20), ние получаваме, че $R_1(u_a(0, t)) = R_2(u_a(0, t)) = 0$ за всяко n . Следователно на тази граница на дифузионния слой не могат да се дефинират запълнителни ограничения.

За оценка на поведението на решението при $x \rightarrow \delta$ и производната на Caputo, където използвайки апроксимираща профил имаме $d^2 u_a(x, t)/dx^2 = [n(n-1)(1-x/\delta)^{n-2}] \delta^{-2}$. С цел да се изпълнят граничните условия на Goodman (3b,c) за $x \rightarrow \delta$ ние получаваме $u_a(\delta, t) = \lim_{x \rightarrow \delta} u_a(x, t) \equiv \lim_{x \rightarrow \delta} (1-x/\delta)^{n-2}$, т.е. дифузионното уравнение се изпълнява при $n > 2$

3.2.2. Брой на членовете от сходящия ред апроксимиращ ${}_{RL} \Phi_1(n, \beta)$

Изразът за дебелината на дифузионния слой съдържа множителя $\Phi_1(n, \alpha, \beta)$ и следователно възникват няколко естествени въпроса:

- Коя е минималната стойност на n , при задени α и β , която осигурява $\Phi_1(n, \beta) > 0$, защото стойността на δ е положителна по природа?
- Колко члена от крайната сума на реда апроксимиращ $\Phi_1(n, \alpha, \beta)$ могат да се използват за рационално провеждане на изчисленията?

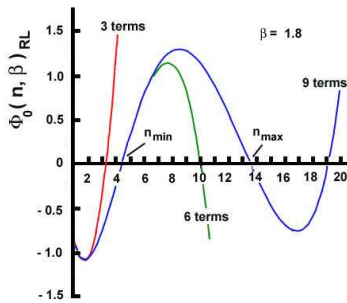
Отговорите на тези въпроси са представени на Фиг. 1a,b за случая на

$${}_{RL}\Phi_0(\alpha=0, n, \beta) = \int_0^1 (\partial^\beta F_a(\eta) / \partial \eta^\beta) d\eta \quad \text{отчитайки}$$

резултатите представени в [48] (Глава 2.5).

Графиките на Фиг. 1a,b показват, че в широк интервал на промяна n имаме $\Phi_0(n, \alpha, \beta) > 0$, която намалява с нарастване на β . Освен това, минималната стойност на n е дефинирана в границите $n_{\min} < n < n_{\max}$.

Числените експерименти представени на Фиг. 2 ясно показват, че в границите на промяна на n ($n_{\min} < n < n_{\max}$), за различни $0 < \alpha < 1$ и $1 < \beta < 2$, получаваме $\Phi_1(n, \alpha, \beta) > 0$. Тези оценки позволяват да се дефинират границите, където стойностите на n , осигуряващи минимум на функцията на грешката, трябва да се търсят.



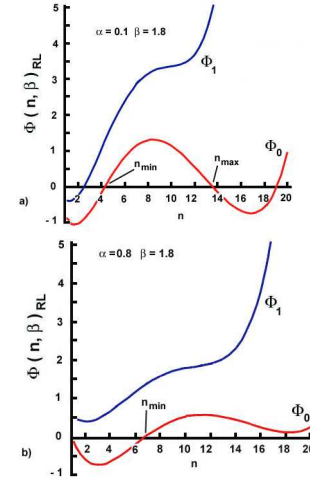
Фиг.1. Ефект на експонентата n върху $\Phi_0(n, \alpha, \beta)$ за $\alpha=0$ и $\beta=1.8$ и броят на членове от апроксимация степенен ред

3.3. Оптимални експоненти на приближените решения

Критерият на Langford [50,51], изисква да бъде изпълнено следното условие

$$E_L(n, \alpha, \beta, t) = \int_0^\delta \left[\frac{\partial u_a}{\partial t} - D_\beta(x^\alpha) \frac{\partial^\beta u_a}{\partial x^\beta} \right]^2 dx \rightarrow \min \quad (21)$$

Изразявайки (26) чрез безразмерната променлива η (26) получаваме

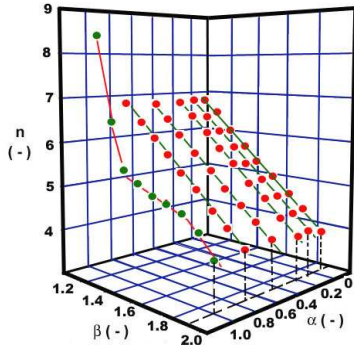


Фиг. 2. Апроксимация на ${}_{RL}\Phi_1(n, \beta)$

- Ефект на n върху $\Phi_0(n, \alpha, \beta)$ и $\Phi_1(n, \alpha, \beta)$ за $\alpha=0.1$ и $\beta=1.8$
- Ефект на n върху $\Phi_0(n, \alpha, \beta)$ и $\Phi_1(n, \alpha, \beta)$ за $\alpha=0.8$ и $\beta=1.8$

$$E_L(n, \alpha, \beta, t) = \int_0^1 \left[n(1-\eta)^{n-1} \frac{\eta}{\delta} \frac{d\delta}{dt} - D_\beta(\eta^\alpha) \left(\frac{1}{\delta} \right)^\beta \frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} \right]^2 d\eta \rightarrow \min \quad (22)$$

- Оптималните експоненти са представени графично на Фиг.3.



Фиг. 3. Тримерна диаграма представяща оптималната n_{opt} като функция на α и β

4. Числени експерименти и анализ на резултатите

4.1. Приближение решения

Приближените решения представени като функции на автомоделната променлива $\xi_p = 1/(D_{\beta 0} t)^{1/(\beta-\alpha)}$ са показани на фиг.4 и фиг.5. Тези числени резултати формират 2 групи. За $0 \leq \alpha \leq 0.5$ приблизително, профилите с големи стойности на β се развиват по-бързо (фиг.4a,b,c), докато за $0 \leq \alpha \leq 0.5$ поведението е точно обратното. Това представяне на резултатите, като две групи, се основава само на реда, по който се подреждат приближените решения по дължина на абсцисата с отчитане изменението на β .

4.3. Средноквадратично преместване и класификация на режимите

За нелинейните дифузионни режими средноквадратичното преместване $\langle x^2 \rangle$ се представя чрез втория момент от функцията $u(x,t)$ [52,53] като

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^\delta x^2 u(x,t) dx \propto t^{\frac{2}{d_w}} \quad (23)$$

За $d_w \neq 2$ класификацията на транспортните режими е както следва [52,53]:

- Дифузията върху фрактална структура се дефилира с $d_w > 2$, т.е. преносът е дисперсионен с редуцирана дифузионна компонента, което отговаря на субдифузионен процес защото $\langle x^2 \rangle \propto t^{2/d_w}$ и $2/d_w < 1$ [54,55];
- За $d_w = 2$ дифузията се описва със закона на Фик.
- При $d_w < 2$ имаме усилен дифузия (*enhanced diffusion*) със следните случаи :
- За $1 < d_w < 2$ имаме междинен транспортен режим (*intermediate transport regime*),
- За $d_w = 1$ имаме балистичен транспорт (*ballistic transport*) и
- За $d_w < 1$ имаме турбулентен транспортен режим (*turbulent transport*).

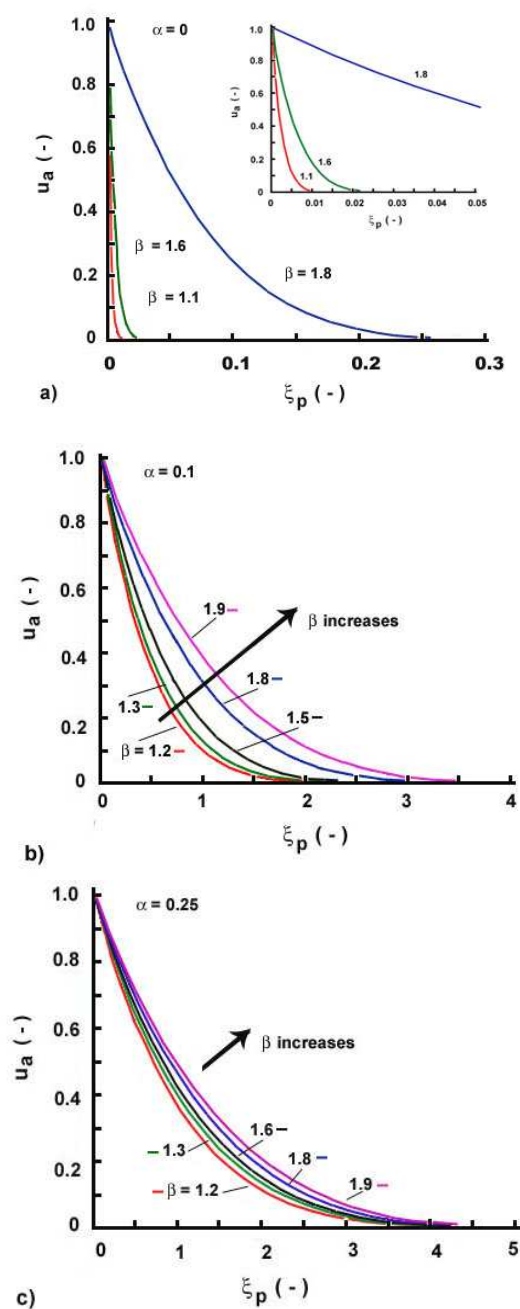
Средноквадратичното преместване $\langle x^2 \rangle$ на разглеждания процес, при използване на апроксимацията профил, е

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^\delta x^2 \left(1 - \frac{x}{\delta}\right)^n dx = \frac{2\delta^2}{(n+1)(n+2)} \quad (24)$$

С израза (16b) за $\delta(t)$ ние получаваме

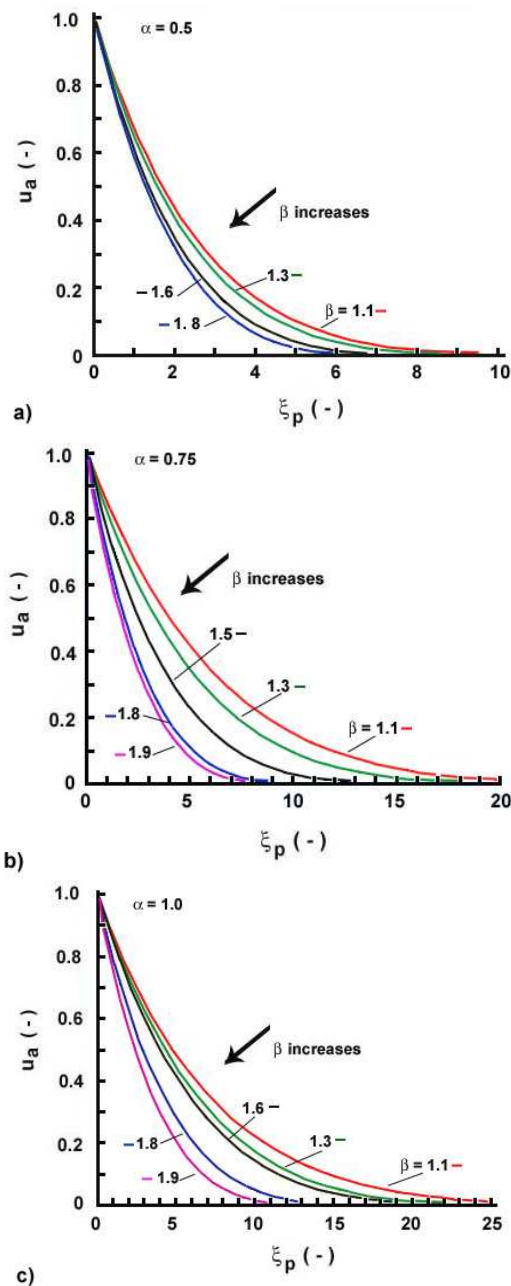
$$\langle x^2 \rangle \equiv \delta^2 \equiv t^{\frac{2}{d_w}}, \quad d_w = \beta - \alpha \quad (25)$$

Разликата $(\beta - \alpha)$ контролира процеса и този факт ще бъде използван за класифициране на те представени чрез приближени решенията (виж Фиг. 4 и Фиг. 5), а именно: За $\alpha = 0$ и $\alpha = 0.1$ ние имаме $1 < (\beta - \alpha) < 2$ и всички профили (решения) се разпространяват в средата все по-бързо с нарастване на стойността на дробния порядък β и следователно описват междинен (преходен) транспортен режим.



Фиг.4. Приблизени решения за случаите, когато редът на подреждане на профилите по дължина на абсцисата следва нарастването на дробния порядък β . Виж Таблица 2 и съответните коментари за детайлис.

- Случай $\alpha = 0$ (intermediate transport)
- Случай $\alpha = 0.1$ (intermediate transport)
- Случай $\alpha = 0.25$ (turbulent transport for $\beta < 1.3$ and intermediate transport for $\beta > 1.3$)



Фиг.5. Приблизени решения за случаите, когато редът на подреждане на профилите по дължина на абсцисата следва намаляването на дробния порядък β . Виж Таблица 2 и съответните коментари за детайлис..

- Случай $\alpha = 0.5$ (turbulent transport for $\beta < 1.5$ and intermediate transport for $\beta > 1.5$). For $\beta = 1.5$ the solution correspond to the ballistic transport
- случай на $\alpha = 1.0$ (turbulent transport)

- За $\alpha = 1$, всички случаи са в границите $0 < (\beta - \alpha) < 1$ и тези профили съответствуват на турбулентен пренос.
- За междинните стойности на α се наблюдава промяна в транспортния механизъм, който зависи от стойността на β , а по-точно :

$$\alpha = 0.25 \quad , \quad \beta < 1.3 \Rightarrow (\beta - \alpha) < 1$$

$$\text{и } 1.3 < \beta < 1.9 \Rightarrow 1 < (\beta - \alpha) < 2 \quad (26)$$

$$\alpha = 0.5 \quad , \quad \beta < 1.5 \Rightarrow (\beta - \alpha) < 1 \quad \text{и}$$

$$1.5 < \beta < 1.9 \Rightarrow 1 < (\beta - \alpha) < 2 \quad (27)$$

$$\alpha = 0.75 \quad , \quad \beta < 1.8 \Rightarrow (\beta - \alpha) < 1 \quad \text{и}$$

$$1.8 < \beta < 1.9 \Rightarrow 1 < (\beta - \alpha) < 2 \quad (28)$$

Използвайки оценките (26-28) следва, че при нарастване на β , съществуват два случая съответстващи на $(\beta - \alpha) = 1$ и това са: $(\alpha = 0.1 \text{ и } \beta = 1.1)$ и $(\alpha = 0.5 \text{ и } \beta = 1.5)$ и в тези случаи фронтът се движи с постоянна скорост. Един пример, поддържащ това мнение, е поведението на решението за $\alpha = 0.5$, където транспортният режим за $\beta < 1.5$ е различен от този при $\beta > 1.5$, независимо от факта, че подреждането на профилите спрямо абсцисата следва същият ред както и при случаите с $(\beta - \alpha) < 1$, по точно за $\alpha = 0.75$ и $\alpha = 1$, съответстващи на турбулентен транспорт.

ИЗВОДИ

Тази глава представя приближени аналитични решения на нестационарни дифузия (задача на Дирихле) описвана чрез подробно по

пространство дифузионно уравнение (с производни на Riemann-Liouville от порядък β) и степенна зависимост на коефициенти на супердифузия от пространствената координата, контролиране от експонента $0 \leq \alpha \leq 1$.

Основна стъпка в това решение е използването на сходящ ред апроксимиращ параболичния профил с недефинирано експонента, позволяваща да се приложат последователно дробно диференциране по пространствената координата и последващо интегриране от цял порядък, съгласно техниката на интегралния метод.

Най-значимият извод от интеграционната процедура е явната връзка между функцията за временното развитие на фронта на решението по закона $t^{1/(\beta - \alpha)}$ и дълбочината на проникване на дифузанта контролирана от разликата $(\beta - \alpha)$.

Средноквадратичното преместване на дифузионния процес представено чрез приближеното решение е $\langle x^2 \rangle \equiv \delta^2 \equiv t^{\frac{2}{(\beta - \alpha)}}$, което позволява да се оцени ефекта на разликата $(\beta - \alpha)$ върху реда на подреждане на разпределенията и моделираните транспортни режими.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Trujillo J, Fractional models: Sub and super-diffusive, and undifferentiable solutions, In: B. H. V.Topping, G. Montero, and R.Montenegro (Eds). *Innovation in Engineering Computational Technology*. Sax-Coburg Publ., Stirling, UK, 2006, pp. 371–402.
- [2] Nigmatullin RR The realization of the generalized transfer equation in a medium with fractal geometry. *Physica Status Solidi (B) Basic Research.*, 1986;133 (1): 425–430.

- [3] Bakunin OG Diffusion Equations and Turbulent Transport. *Plasma Physics Reports*. 2003; 29 (11): 955–970.
- [4] Lenzi MK, Gonçalves G, Leitões DP, Lenzi EK. Fractional diffusion Equation, Sorption and reaction processes on a surface. In: Cattani C Srivastava , Yang XJ (Eds.) *Fractional Dynamics*, De Gruyter Open, Berlin, 2015, pp. 129-140.
- [5] Hilfer R., *Applications of Fractional Calculus in Physics*, World Scientific, 2000, Hackensack, NJ, USA.
- [6] Yang XJ, Baleanu, D, Srivastava HM. *Local Fractional Integral Transforms and Their Applications*. Academic Press, 2015, London, UK.
- [7] Gómez-Aguilar JF, López-López, MG, Alvarado-Martínez, VM, Reyes-Reyes, J, Adam-Medina, M, Modeling diffusive transport with a fractional derivative without singular kernel, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2016, 447, pp. 467-481.
- [8] G Gómez-Aguilar, JF., Miranda-Hernández, M, López-López, MG., Alvarado-Martínez, VM, Baleanu, D , Modeling and simulation of the fractional space-time diffusion equation, *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 2016, 30(1), 115-127
- [9] Atangana, A., On the new fractional derivative and application to nonlinear Fisher's reaction-diffusion equation. *Applied Mathematics and Computation*, 2016, 273, 948-956.
- [10] Hristov J., Transient Heat Diffusion with a Non-Singular Fading Memory: From the Cattaneo Constitutive Equation with Jeffrey's kernel to the Caputo-Fabrizio time-fractional derivative, *Thermal Science*, 20 (2) (2016), pp.765-770.
- [11] Hristov J., Steady-State Heat Conduction in A Medium With Spatial Non-Singular Fading Memory: Derivation of Caputo-Fabrizio space-fractional derivative with Jeffrey's kernel and analytical solutions , *Thermal Science*, 2017, Vol. 21, No. 2, pp. 827-839
- [12] Wu, GC, Baleanu, D, Zeng, SD, Deng, ZG , Discrete fractional diffusion equation, *Nonlinear Dynamics*, 2015, 80 (1-2), 281-286.
- [13] Yang, XJ, Baleanu, D, Srivastava, HM, Local fractional similarity solution for the diffusion equation defined on Cantor sets. *Applied Mathematics Letters*, 2015, 47, 54-60.
- [14] Luchko Yu, Srivastava HM The exact solution of certain differential equations of fractional order by using operational calculus. *Comp. Math. Appl.* 1995 (29) (8), pp.73-85.
- [15] He JH Approximate analytical solution for seepage flow with fractional derivatives in porous media. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 1998;167 (1-2), pp. 57-68.
- [16] Molliq RY, Noorani MS M, Hashim I Variational Iteration Method for Fractional Heat- and Wave-Like Equations. *Nonlinear Anal., Real World Appl.* 2009; 10 (3), pp.1854–1869.
- [17] Nakagawa J , Sakamoto K, Yamamoto M Overview to mathematical analysis for fractional diffusion equations—new mathematical aspects motivated by industrial collaboration,. *J. Math-for-Indust.* (2010) 2 (10), pp.99-108.
- [18] Das S, Gupta PK, Ghosh P An approximate analytical solution of Nonlinear Fractional Diffusion Equation. *Appl. Math. Model.* 2011; 35 (8), pp.4071-4076.
- [19] Wu GC Variational iteration method for solving the time-fractional diffusion equations in porous medium. *Chin. Phys. B*. 2012; 21(22). Article ID 120504 ; DOI: 10.1088/1674-1056/21/12/120504
- [20] Wu GC Applications of the Variational Iteration Method to Fractional Diffusion Equations: Local versus Nonlocal Ones. *Int. Rev. Chem. Eng.* 2012;4(5): 505–510..
- [21] Wu GC, Baleanu D Variational iteration method for fractional calculus - a universal approach by Laplace transform. *Advances in Difference Equations*. 2013 ,2013:18; doi:10.1186/1687-1847-2013-18
- [22] Liu F, Shen S, Anh V, Turner I Analysis of a discrete non-Markovian random walk the time fractional diffusion equation. *ANZIAM J.* 2004;46(E):488–504.
- [23] Liu F, Zhuang P, Anh, V, Turner I, Burrage K Stability and convergence of the difference methods for the space-time fractional advection-diffusion equation. *Appl Math Comput.* 2007; 191 (1), pp. 12–20.
- [24] Zhuang P, Liu F Implicit difference approximation for the time fractional diffusion equation. *J Appl Math Comput.* 2006; 22 (3), pp. 87–99.
- [25] Meerschaert MM, Tadjeran C Finite difference approximations for two-sided space-fractional partial differential equations. *Appl Numer Math.* 2006; 56 (1), pp.80–90.
- [26] Basu TS, Wang H A fast second-order finite difference method for space-fractional diffusion equations. *Int J Numer Anal Mod.* 2012, 9 (5), pp. 658–666.
- [27] Podlubny I *Fractional Differential Equations*, Academic Press, New York, 1999
- [28] Ervin V J, Heur N, Roop J. Numerical approximation of a time dependent, nonlinear, space-fractional diffusion equation. *SIAM J. Num Anal.* 2008;45(2):572–591.
- [29] Li CP, Zhao ZG, Chen YQ Numerical approximation of nonlinear fractional differential equations with subdiffusion and superdiffusion. *Comp. Math. Appl.* 2011, 62 (3), pp.855-875.

- [30] Sapora A, Corneti P, Carpinteri A Diffusion problems on fractional nonlocal media. *Centr. Eur. J. Phys.* 11 2013; 11(10),pp. 1255-1261.
- [31] El-Kady M, El-Sayed SM, Salem HS El-Gendi Nodal Galerkin method for solving linear and nonlinear partial fractional space equations. *Int. J. Latest Res. Sci. Technol.* 2013, 2(6),pp. 10-17.
- [32] Zheng Y, Zhao Z A fully discrete Galerkin method for a nonlinear space-fractional diffusion equation, *Math. Problems in Engineering*. 2011; Article 171620, 20 pages. doi: 10.1155/2011/171620
- [33] Saadatmandi A, Dehghan M, A tau approach for solution of the space fractional diffusion equation. *Comp. Math. Appl.* 2011; 62 (3),pp.1135-1142.
- [34] Nie N, Huang J, Wang W, Tang Y Solving spatial-fractional partial differential diffusion equations by spectral method. *J. Stat. Comp. Sim.* 2014; 84 (6),pp. 1173-1189.
- [35] Ray SS A new approach for the application of Adomian decomposition method for the solution of fractional space diffusion equation with insulated ends. *Appl. Math. Model.* 2008; 202 (2): 544-549.
- [36] Ray SS Analytical solution for the space fractional diffusion equation by two-step Adomian decomposition method. *Comp.Nonlinear Sci. Num. Simul.*, 2009; 14(4): 1295-1306.
- [37] Ray SS Chaudhuri Bera RK Application of modified decomposition method for the analytical solution of space fractional diffusion equation. *Appl. Math. Comput.* 2008; 196 (1): 294-302.
- [38] Huang F, Liu F The space-time fractional diffusion equation with Caputo derivatives, *Appl. Math & Computing*. 2005; 19 (1-2): 179-190.
- [39] Huang F, Liu F The fundamental solution of the space-time fractional advection-diffusion equation. *J.Appl. Math & Computing*. 2005 19 (1-2): 339-350.
- [40] Aguilar JFG, Hernandez MM Space-time fractional diffusion-advection equation with Caputo derivative. *Abstract and Applied Analysis*. 2014, Article ID 283019, 8 pages. doi: 10.1155/2014/283019
- [41] Saadatmandi A, Dehghan M A tau approach for solution of the space fractional diffusion equation. *Comp. Math.Appl.* 2011; 62 (3):1135-1142.
- [42] Hristov J., Integral solutions to transient nonlinear heat (mass) diffusion with a power-law diffusivity: a semi-infinite medium with fixed boundary conditions, *Heat Mass Transfer*, 2016, 52 (3): 635-655.
- [43] Goodman TR, Application of Integral Methods to Transient Nonlinear Heat Transfer, In:Irvine TF and Hartnett JP (Eds.), *Advances in Heat Transfer*, 1 (1964), Academic Press, San Diego, CA, pp. 51-122.
- [44] Hristov J The heat-balance integral method by a parabolic profile with unspecified exponent: Analysis and benchmark exercises. *Thermal Science* 2009; 13 (2); 22-48.
- [45] Hristov J Heat-Balance Integral to Fractional (Half-Time) Heat Diffusion Sub-Model. *Thermal Science*. 2010; 14 (2): 291-316.
- [46] Hristov J Approximate Solutions to Fractional Subdiffusion Equations: The heat-balance integral method. *Europ. Phys. J.-ST.* 2011; 193 (1): 229-243. doi: 10.1140/epjst/e2011-01394-2.
- [47] Hristov J Approximate solutions to time-fractional models by integral balance approach. In: Cattani C Srivastava , Yang XJ (Eds.). 2015, pp. 78-109.
- [48] Hristov J An approximate solution to the transient space-fractional diffusion equation: Integral-balance approach, optimization problems and analyzes . *Thermal Science*, 21 (2017), 1A, pp. 309-321.
- [49] Oldham KB, Spanier J, *The fractional Calculus*. Academic Press, New York, USA, 1974.
- [50] Hristov J, Double Integral-Balance Method to the Fractional Subdiffusion Equation: Approximate solutions, optimization problems to be resolved and numerical simulations, *J. Vibration and Control*, in press. doi: 10.1177/1077546315622773.
- [51] Langford D The heat balance integral method. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1973; 16 (12): 2424-2428.
- [52] Vlad MO, Metzler R, Nonnenmacher TF, Mackey MC, Universality classes for asymptotic behavior of relaxation processes in systems with dynamical disorder: Dynamical generalization of stretched exponentials, *J. Math. Phys.*1966; 37(5) : 2279-2301
- [53] Baumann G., Sudland N, Nonnenmacher TF, Anomalous relaxation and diffusion processes in complex systems, *Transp. Theory and Stat Phys*, 2000; 29 (1-2), 151-171.
- [54] Fa, K.S., Lenzi, E.K. , Time-fractional diffusion equation with time dependent diffusion coefficient, *Physica A*, 72 (2005) , article 011107 doi: 10.1103/PhysRevE.72.011107.
- [55] Fa, K.S., Lenzi, E.K. , Power law diffusion coefficient and anomalous diffusion: Analysis of solutions and the first passage time. *Physical Review E*, 67 (2003) article 061105, doi: 10.1103/PhysRevE.67.0

ГЛАВА 2.7

НЕСТАЦИОНАРНА СУПЕРДИФУЗИЯ С ПОТЕНЦИАЛНО-СТЕПЕНЕН* ДИФУЗИОНЕН КОЕФИЦИЕНТ

Главата представя приближено аналитично решение на супердифузионно уравнение с дробна по пространство производна на Riemann–Liouville. Използван е интегрален метод и апроксимиращ профил с недефинирана експонента. Дискутирана е пространствената корелация на супердифузионния коефициент и нейната физическа адекватност. Законът за временното развитие на фронта на решението е една от основните разглеждани задачи.

1. Въведение

1.1. Супердифузионен модел

Дробните диференциални уравнения (FDEs) позволяват да се моделират аномални дифузионни процеси в комплексни среди срещани във физиката [1], течения в порести среди [2], плазмени процеси [3] и турбулентен пренос [4]. Аналитичните решения на FDEs не са твърде популярни в литературата [5,6,7,8,9,10,11,12], поради сложността на проблема и невъзможността за последващ инженерен анализ, поради което често се прилагат числени методи [13,14,15,16,17].

Тази глава разглежда едномерен аномален супердифузионен модел от порядък $1 < \beta < 2$ и потенциално-степенна зависимост на

дифузионния коефициент (potential power-law)

$D_\beta [m^\beta/s]:$

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = D_\beta(x) \frac{\partial^\beta u(x,t)}{\partial x^\beta},$$

$$u(x,0) = u_x(x,0) = 0, \quad u(0,t) = 1, \quad u(\infty,t) = 0 \quad (1a)$$

$$D_\beta(x) = D_{\beta 0} + \gamma_x x^\alpha, \quad \alpha \leq \beta \text{ и } x > 0, \quad D_{\beta 0} > 0,$$

$$\gamma_x \geq 0 \quad (1b)$$

В модела (1a) пространствената производна може да бъде както от тип на Riemann-Liouville така и $(1 < \beta < 2)$ [18],

Цитираните по-горе числени методи доминират в литературата [19,20,21,22,23,24,25], докато аналитичните решения да сравнително редки [26,27,28,29,30,31,32]. Следователно, получаването на аналитични решения позволяващи директен физичен анализ за инженерни приложения е сериозно предизвикателство.

1.2. Супердифузионен коефициент $D_\beta(x)$ и неговата физически коректна пространствена корелация

Преди детайлното представяне на решението ние фокусираме вниманието върху използваните пространствени корелации на $D_\beta(x)$, като съществен момент свързан с физичната адекватност на модела представен с уравнение (1b). Коефициентът на супердифузия представен като степенна функция $D_\beta(x) = D_{\beta 0} x^\alpha$ (Глава 2.6) е най-често използваната корелация в различни числени примери илюстриращи различни подходи да решаване на модела (1a) [28,32]. Освен това при

* Публикувано като: **Hristov J., Space-fractional diffusion with a potential power-law coefficient: Transient approximate solution, *Progr. Fract. Differ. Appl.*, 3, No. 1, 19-39 (2017).**

$x=0$ получаваме $D_\beta(x=0)=0$ и виждаме че уравнение (1a) дегенерира. Ако в този случай е необходимо да се изчисли потокът на границата $x=0$, представен като $q = -D_\beta(0) \left[\partial^\beta f(0,t) / \partial x^\beta \right]$, то веднага се вижда физическата неадекватност на ситуацията, защото транспортния коефициент $D_\beta(x)$ не може да бъде нула, където и да е, в разглежданата област. Тъй като коефициентът на супердифузия не може да бъде равен на нула на границата, ние предлагаме една алтернативна форма за пространствена корелация на $D_\beta(x)$, а именно

$$D_\beta(x) = D_{\beta 0} + \gamma_x x^\alpha \Rightarrow \\ \Rightarrow D_\beta(x) = D_{\beta 0} \left(1 + k_x x^\alpha \right), \text{ за } 0 \leq x \leq \infty \quad (2a,b)$$

С корелацията (3a) при $x=0$ уравнение (1a) вече не моделира дегенерираща дифузия защото $D_\beta(x=0) = D_{\beta 0} \neq 0$. Размерността на γ_x е $m^{\beta-\alpha}/s$ защото пълната корелация на $D_\beta(x)$ трябва да има размерност m^β/s ; и респективно размерността на $k_x = \gamma_x/D_{\beta 0}$ е $[1/m^\alpha]$. Важно е да се отбележи, че функционалната зависимост (3a,b) е твърде често използвана в моделите на дифузия и топлопроводност от цял порядък [33,34,35,36] и се нарича *потенциално степенна зависимост* (potential power-law diffusivity). **Поточно формата (3a), до този момент не е използвана, в публикуваната до сега литература, при супердифузионни модели и се предлага за първи път тук (и в публикацията лежаща в основата на тази глава). Понататъшното развитие на тази глава разглежда**

двете форми за корелация на $D_\beta(x)$ представени чрез (1b) и (3).

Тази глава демонстрира прилагане на интегрален метод [37, 38,39,40,41] за получаване на приближено аналитично решение на супердифузионно уравнение (1) в случай на задача на Дирихле и пространствени дробни производни на Riemann-Liouville.

2. Задача на Дирихле

2.1. Интегрален метод

Да разгледаме модела (1a) с начални и гранични условия

$$u(x,0)=0, \quad u(0,t)=1, \quad u(\infty,t)=0 \text{ за } t>0 \quad (3a,b,c)$$

Интегралният метод използва принципа за крайна дълбочина на проникване на дифузанта и формирането на рязък фронт $\delta(t)$, позволяващ граничното условие $u(\infty,t)=0$ да се предефинира във формата

$$u(0)=1, \quad u(\delta) = \frac{\partial}{\partial x} u(\delta) = 0 \quad (4a,b,c)$$

Основните техники за интегриране бяха демонстрирани в Глава 2.5 и Глава 2.6.

2.2. Апроксимиращ профил и смяна на пространствения мащаб

За решаване на задачата се използва параболичен профил с недефинирана експонента [38,39,40,41], а именно

$$u_a(x) = \left(1 - \frac{x}{\delta} \right)^n, \quad 0 \leq x \leq \delta, \quad n > 0 \quad (5)$$

Този профил изпълнява граничните условия (4a,b, c) и формира две зони: $u_a(x) > 0$ for $x < \delta$ and

$u_a(x) = 0$ за $x \geq \delta$. Решението използващо профила (8) изисква експонента $n > 0$, която трябва да зависи от степента на дробния порядък β .

За да бъдем коректни при изразяването на пространствената производна $\partial^\beta u_a(x)/x^\beta$ ние сменяме променливата в (1a) с $\eta = x/\delta$, където $0 \leq \eta \leq 1$. По този начин, профилът изразен чрез η е $u_a(x) \Rightarrow F_a(\eta) = (1-\eta)^n$ и пространствената производна от него може да се представи като:

$$\frac{\partial^\beta u_a(x)}{\partial x^\beta} = \left(\frac{1}{\delta}\right)^\beta \frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} \quad (6)$$

$$\frac{d}{dt} \int_0^\delta u_a(x,t) dx = \frac{1}{n+1} \frac{d\delta}{dt} \quad (7)$$

2.3.2. Дифузионна дълбочина на проникване $\delta(t)$

Интегралното съотношение, след заместване на $u(\eta)$ с $F_a(\eta) = (1-\eta)^n$, води до следното обикновено диференциално уравнение

$$\begin{aligned} \frac{1}{n+1} \frac{d\delta}{dt} &= D_{\beta 0} \delta^{1-\beta} \int_0^1 \frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} d\eta + \\ &+ \gamma_x \delta^{1+\alpha-\beta} \int_0^1 \eta^\alpha \frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} d\eta \end{aligned} \quad (8a)$$

$$\frac{1}{n+1} \frac{d\delta}{dt} = D_{\beta 0} \delta^{1-\beta} \Phi_0(n, \alpha, \beta) + \gamma_x \delta^{1+\alpha-\beta} \Phi_1(n, \alpha, \beta) \quad (8b)$$

$$\Phi_0(n, \alpha, \beta) = \int_0^1 \frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} d\eta \quad (9a)$$

$$\Phi_1(n, \alpha, \beta) = \int_0^1 \eta^\alpha \frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} d\eta \quad (9b)$$

Уравнение (8b) може да бъде представено като

$$\frac{1}{\beta(n+1)} \frac{d\delta^\beta}{dt} = D_{\beta 0} \Phi_0(n, \alpha, \beta) + \delta^\alpha \gamma_x \Phi_1(n, \alpha, \beta) \quad (10)$$

Уравнение (14) е нелинейно редуцирано диференциално уравнение на Бернули и няма директно решение чрез класическите методи използващи интегриращ множител, защото целта е да се реши в общ вид, а не за специфични стойности на α и β . За решение на проблема са използвани два алтернативни подхода, от предхождащи изследвания за приближено решаване на нестационарни дифузионни уравнения с пространствени дробни производни [42,43], а именно

- **Подход 1 :**

Ако използваме означението $y = \delta^\beta$, където $\delta^\alpha = y^{\alpha/\beta}$, получаваме нелинейно обикновено диференциално уравнение

$$\frac{dy}{dt} = a + by^p, \quad p = \frac{\alpha}{\beta} \quad (11a)$$

$$\begin{aligned} a &= D_{\beta 0} \beta(n+1) \Phi_0(n, \alpha, \beta), \\ b &= \gamma_x \beta(n+1) \Phi_1(n, \alpha, \beta) \end{aligned} \quad (11b)$$

С функционалната връзка $y = \lambda t$, която идва интуитивно от решението на уравнение (1a), когато $D_\beta = D_{\beta 0}$ [42] (Глава 2.5) и съответствува на първият член от разширеното уравнение (8a). Функционалната връзка $\delta^\beta = y = \lambda t$ изпълнява началните и гранични условия $\delta^\beta(0) = y(0) = 0$, а множителят λ трябва да бъде определен в хода на решението. Следователно, използвайки тази

субституция получаваме $\delta^\alpha = y^{\alpha/\beta} = y^p = \lambda^p t^p$.

Решението чрез трансформацията на Лаплас, с използване на условието $\delta(0) = 0 \Rightarrow y(0) = 0$, е

$$\delta^\beta = at + b\lambda^{\frac{\alpha}{\beta}} \frac{t^{1+\frac{\alpha}{\beta}}}{1+\alpha/\beta} \quad (12)$$

$$\delta = (at)^\frac{1}{\beta} \left[1 + \frac{b}{a} \lambda^{\frac{\alpha}{\beta}} \frac{1}{1+\alpha/\beta} t^\frac{\alpha}{\beta} \right]^\frac{1}{\beta} \quad (13)$$

За $b = 0$ получаваме $\delta = (at)^\frac{1}{\beta}$, т.е. решението за случая на постоянен дифузионен коефициент [42]

(Глава 2.5)

Сега, нека обърнем внимание на дефинирането на множителя λ . Тъй като δ е дълбочината на проникване на дифузанта с *размерност на дължина* $[m]$, то от тук следва, че членът в квадратните скоби на (13) трябва да бъде безизмерен, а по-точно отношението $(b\lambda^p/a)$ трябва да има размерност $s^{-\alpha/\beta}$, което резонно изисква λ да е с размерност m^β/s , т.е. да съпада с коефициента на супердифузия $D_{\beta 0}$. Следователно, субституцията $\delta^\beta = y = \lambda t$ е еквивалентна на $\delta^\beta = D_{\beta 0} t$, което е частно решение на линейната задача [42], както беше коментирано по-рано.

• Подход 2

Ако разделим двете страни на уравнение (8b) с $\delta^{1+\alpha-\beta}$ се получава

$$\frac{d\delta^{\beta-\alpha}}{dt} = c\delta^{-\alpha} + d \quad (14a)$$

$$c = (\beta - \alpha) D_{\beta 0} \Phi_0(n, \alpha, \beta),$$

$$d = (\beta - \alpha) \gamma_x \Phi_1(n, \alpha, \beta) \quad (14c, d)$$

С $\delta^{\beta-\alpha} = z$ ние получаваме уравнение на Бернули

$$\frac{dz}{dt} = cz^k + d \quad (15)$$

Със субституцията $\delta^{\beta-\alpha} = z = \mu t$ и трансформация на Лаплас, решението на (15) е

$$\delta^{\beta-\alpha} = dt + c\mu^{-\alpha/(\beta-\alpha)} \frac{t^{-\alpha/(\beta-\alpha)}}{1-\alpha/(\beta-\alpha)} \quad (16)$$

Следователно, дифузионната дълбочина на проникване, във форма подобна на (13), е

$$\delta = (dt)^\frac{1}{\beta-\alpha} \left[1 + \frac{c}{d} \mu^k \frac{1}{[1-\alpha/(\beta-\alpha)]} t^\frac{-\alpha}{\beta-\alpha} \right]^\frac{1}{\beta-\alpha} \quad (17)$$

Сега, фокусирайки се върху определяне на множителят μ , ние ще вървим по стъпките приложени вече в Подход 1. Тъй като δ е с размерност на дължина, лесно може да се види, че $(dt)^{1/(\beta-\alpha)} \propto (\gamma_x t)^{1/(\beta-\alpha)}$ има също размерност на дължина, защото по дефиниция, размерността на γ_x е $m^{\beta-\alpha}/s$. Тогава, членът в квадратните скоби на (22) трябва да бъде безизмерен и произведението $\mu^k (c/d) = \mu^k (D_{\beta 0}/\gamma_x)$ трябва да има размерност s^{-k} . По-точно, отношението $(D_{\beta 0}/\gamma_x^{1-k})$ дефинира характеристичното време на процеса, което ще бъде коментирано в следващата точка. Следователно, субституцията $\delta^{\beta-\alpha} = z = \mu t$ е еквивалентна на $\delta^{\beta-\alpha} = \gamma_x t$, което е частно решение на случая със степенен коефициент на супердифузия $D_\beta = D_{\beta 0} x^\alpha$ [43] (Глава 2.5), както беше отбелязано по-горе.

2.3.3. Дробно характеристично време и дефиниране на числото Hr

Решението (18b) относно $\delta(t)$, позволява да се дефинира дробно число на Фурие (fractional Fourier number) по следният начин.

Тъй като $\lambda = D_{\beta 0}$, то тогава отношението $b/a = (\gamma_x / D_{\beta 0}^{1-\alpha/\beta}) (\Phi_2 / \Phi_1)$ е характеристичното време дефинирано като $t_1 = (b/a) \lambda^{\alpha/\beta} = (D_{\beta 0}^{1-\alpha/\beta} / \gamma_x)$ с размерност $[s^{\alpha/\beta}]$. Тогава, отношението $t^{\alpha/\beta} / t_1 = (b/a) \lambda^{\alpha/\beta} t^{\alpha/\beta} = {}_s Hr_1$ е квази-дробно число на Фурие (quasi-fractional Fourier number). В термини на параметрите на процеса ${}_s Hr$ може да се дефинира като

$${}_s Hr_1 = \frac{\gamma_x t^{\alpha/\beta}}{D_{\beta 0}^{1-\alpha/\beta}} \quad (18)$$

Долният префикс s означава „пространство“ (space). За контраст на разгледаната ситуация, в по-простия случай, когато $D_\beta(x) = D_{\beta 0} x^\alpha$, такава дефиниция е невъзможна защото в полубезкрайна среда няма физически дефинирана характеристична дължина. Предимството на дефиницията (2) е нейната физическа адекватност и възможността да се представи дълбочината на проникване на дифузанта (виж 13) като

$$\delta_1 = (at)^{\frac{1}{\beta}} \left[1 + {}_s Hr_1 \frac{\Psi(n, \alpha, \beta)}{\Gamma(2 + \alpha/\beta)} \right]^{\frac{1}{\beta}},$$

$$\Psi(n, \alpha, \beta) = \frac{\Phi_1(n, \alpha, \beta)}{\Phi_0(n, \alpha, \beta)} \quad (19a, b)$$

Сега, с $a = D_{\beta 0} \beta (n+1) \Phi_0(n, \alpha, \beta)$ от (11b) получаваме израза

$$\delta_1 = (D_{\beta 0} t)^{\frac{1}{\beta}} \left[\beta (n+1) \Phi_0(n, \alpha, \beta) \right]^{\frac{1}{\beta}} \times \left[1 + {}_s Hr_1 \frac{\Psi(n, \alpha, \beta)}{(1 + \alpha/\beta)} \right]^{\frac{1}{\beta}} \quad (20)$$

Следователно, приносът на вторият член от формулировката на коефициента на супердифузия (виж 3а) към еволюцията на дифузионния слой зависи от отношението $D_{\beta 0}^{1-\alpha/\beta} / \gamma_x$, а неговото развитие във времето е пропорционално на $t^{\alpha/\beta}$ (виж 18b). Тъй като $\alpha/\beta < 1$, то следва, че нарастването във времето на вторият член в (20) е по-бавно отколкото това на множителя $(D_{\beta 0} t)^{1/\beta}$, който реално доминира супердифузионния процес.

От друга страна, ако се използва резултатът от **Подход 2)**, ние можем да дефинираме алтернативно характеристично време t_2 . Машабът за време t_2 представен чрез променливите управляващи процеса е

$$\frac{c}{d} \mu^k t^{-\frac{\alpha}{\beta-\alpha}} = \left(\frac{D_{\beta 0}}{\gamma_x^{1-k}} \right) t^k = \frac{t^k}{t_2^k}, \quad (21)$$

$$t_2 = \left(\frac{D_{\beta 0}}{\gamma_x^{1-k}} \right)^{\frac{1}{k}} = \frac{\gamma_x^{\beta/\alpha}}{D_{\beta 0}^{(\beta-\alpha)/\alpha}} = \left(\frac{\gamma_x^\beta}{D_{\beta 0}^{(\beta-\alpha)}} \right)^{\frac{1}{\alpha}} \quad (22)$$

Отношението (21) може да се разглежда също като квази-число на Фурие ${}_s Hr_2 = t/t_2$, водещо до алтернативна форма на израза за дифузионната дебелина на слоя

$$\delta_2 = (\gamma_x t)^{\frac{1}{\beta-\alpha}} \left[(\beta-\alpha) \Phi_1(n, \alpha, \beta) \right]^{\frac{1}{\beta-\alpha}} \times \left[1 + {}_s Hr_2 \frac{1}{\Psi(n, \alpha, \beta) [1 - \alpha/(\beta-\alpha)]} \right]^{\frac{1}{\beta-\alpha}} \quad (23)$$

Дефинициите на ${}_s Hr_1$ и ${}_s Hr_2$ поставят въпроса: къде е разликата между тях и как да се процедира по-нататък в изчисленията? Отговорът е директен: Тъй като ${}_s Hr_1 = t/t_1$ и ${}_s Hr_2 = t/t_2$, то тогава отношението ${}_s Hr_1 / {}_s Hr_2 = t_2/t_1$, е отношение на характеристичните времена, а по-точно

$$\frac{{}_s Hr_1}{{}_s Hr_2} = \frac{t_2}{t_1} = \frac{\gamma_x^{\beta/\alpha}}{D_{\beta 0}^{\beta/\alpha-1}} \frac{D_{\beta 0}^{\beta/\alpha-1}}{\gamma_x^{\beta/\alpha}} = 1 \quad (24)$$

Следователно, двете дефиниции са еквивалентни, т.е. ${}_s Hr_1 = {}_s Hr_2 = {}_s Hr$.

2.3.4. Скорост на проникващия фронт и ограничения върху експонентата α

Стойностите на α и β дефинират поведението на дифузионния процес и от тази гледна точка е важно да се обясни ясно какъв е механизма на влияние върху решението, и по какъв начин могат да бъдат класифицирани режимите на транспорт споменати в началото.

2.3.4.1. Бърза супердифузия

Необходимостта условието $\beta > \alpha$ трябва да бъде изпълнено се диктува от физиката на процеса: *нарастваща във времето дълбочина на дифузионния слой*, което налага $1/(\beta - \alpha) > 0$. Ако за дадена стойност на β експонентата α расте, то тогава нараства и експонентата $1/(\beta - \alpha)$, т.е. имаме *бързо развитие във времето на фронта на решението*. В обратния случай, за намаляващи стойности на α , експонентата $1/(\beta - \alpha)$ ще намалява и дифузията се забавя.

Следователно, *бързият супердифузионен (fast superdiffusion)* процес съответствува на нарастващи стойности на α в интервала $0 \leq \alpha \leq 1$, защото по дефиниция имаме $1 < \beta < 2$.

Скоростта на фронта $\delta_2(t)$ е $d\delta_2/dt \propto [1/(\beta - \alpha)] t^{\frac{1+\alpha-\beta}{\beta-\alpha}}$. Условието $1 + \alpha - \beta > 0$ заедно с $\beta > \alpha$ осигурява нарастваща във времето скорост на фронта. По-точно, трябва да е изпълнено условието $\alpha > \beta - 1$, за $0 < \alpha < 1$. В обратния случай, за $1 + \alpha - \beta < 0$, фронтът ще се развива със скорост, която ще затихва във времето. По-точно, в случай на затихваща скорост имаме $\alpha < \beta - 1$. По-нататък, за специфичния случай на $\alpha = 0$ (постоянен коефициент на супердифузия) скоростта на фронта е $d\delta/dt \propto (1/\beta) t^{(1-\beta)/\beta}$. Тъй като отношението $(1 - \beta)/\beta$ е винаги отрицателно следва, че фронтът ще се развива със затихваща във времето скорост.

За междинния случай, когато $\alpha = \beta - 1$, фронтът $\delta_p(t) = (D_{\beta 0} t)^{(n+1)} \Phi_1(n, \alpha, \beta)$ нараства линейно във времето, с постоянна скорост $d\delta/dt = D_{\beta 0} (n+1) \Phi_1(n, \alpha, \beta)$. За $\beta = \alpha$ имаме $\delta = 0$ и взривно поведение на скоростта на фронта, но тази ситуация е невъзможна защото направените по-горе оценки ясно дефинират интервалите $0 \leq \alpha \leq 1$ и $1 < \beta < 2$. Настоящата глава се отграничава в изследванията само за ситуациите, когато $0 \leq \alpha \leq 1$, с цел по-пълно изследване на демпфиращото влияние на дробният порядък β . Случаите, когато $1 < \alpha < \beta$

, а също и за $\alpha < 0$, са извън обсега на настоящото изследване.

Всички случаи, дискутирани от тук нататък, фокусират вниманието върху анализа на приближените решения разглеждайки аномалната дифузия като зависима от разликата $(\beta - \alpha)$.

2.3.4.2. Бавна супердифузия

Изразът относно функцията представяща дифузионния фронт, без загуба на общност, за $\alpha < 0$, но при условие $|\alpha| < 1$, с цел представяне по аналогия със случая на бърза супердифузия, е

$$\delta_2(t) \equiv (D_{\beta 0} t)^{\frac{1}{\beta + \alpha}} [(\beta + \alpha)(n + 1) \Phi_1(n, \alpha, \beta)]^{\frac{1}{\beta + \alpha}} \quad (25)$$

Ако за фиксирана стойност на β абсолютната стойност на α нараства, тогава експонентата $1/(\beta + \alpha)$ намалява и дифузията ще се развива с намаляваща скорост. В обратния случай, ако α намалява, нарастването във времето на δ ще бъде по-бързо. Следователно, процесите на бавна супердифузия (*slow superdiffusion process*) съответствуват на нарастващи абсолютни стойности на α , когато $\alpha < 0$.

Обръщайки внимание на случая с $\alpha = 0$, когато пространствения демпфиращ ефект зависи само от β ние имаме *бавна супердифузия* (*slow superdiffusivity*). От това следва, че за $\alpha > 0$ (*бърза пространствена супердифузия*) (*fast spatial superdiffusivity*) дифузантът прониква по бързо в средата, в сравнение с обратния случай на $\alpha < 0$ (*бавна пространствена супердифузия*) (*slow spatial superdiffusivity*), когато дифузионния процес е по-бавен от този наблюдаван при $\alpha = 0$.

2.3.5. Приближени профили

След определяне на дифузионната дълбочина на проникване, приближените решения могат да се представят като

$$u_{a1} = \left(1 - \frac{x}{(D_{\beta 0} t)^{\frac{1}{\beta}}} \right)^n = \left(1 - \frac{\xi_1}{N_1(n, \alpha, \beta, {}_s H r)} \right)^n \quad (26a,b)$$

$$N_1 = (\beta(n + 1) \Phi_0(n, \alpha, \beta))^{\frac{1}{\beta}} \left[1 + {}_s H r \frac{\Psi(n, \alpha, \beta)}{(1 + \alpha/\beta)} \right]^{\frac{1}{\beta}} \quad (26c)$$

$$u_{a2} = \left(1 - \frac{x}{(\gamma_x t)^{\frac{1}{\beta - \alpha}} N_2} \right)^n = \left(1 - \frac{\xi_2}{N_2(n, \alpha, \beta, {}_s H r)} \right)^n \quad (27a,b)$$

$$N_2 = \left[\frac{(\beta - \alpha) \Phi_1(n, \alpha, \beta)^{\frac{1}{\beta - \alpha}} + ({}_s H r)^{\frac{-\alpha}{\beta - \alpha}} \frac{(\beta - \alpha) \Phi_0(n, \alpha, \beta)}{1 - \alpha/(\beta - \alpha)}}{1} \right]^{\frac{1}{\beta - \alpha}} \quad (27c)$$

Приближеното решение дефинира по естествен път не-Болцманова автомоделна променлива

$$\xi = x / (D_{\beta 0} t)^{1/\beta}$$

2.4. Изчисляване и оценка на $\Phi_0(n, \alpha, \beta)$,

$\Phi_1(n, \alpha, \beta)$ и отношението $\Psi(n, \alpha, \beta)$

Изчисляването на $\Phi_0(n, \beta)$ и $\Phi_1(n, \alpha, \beta)$ ще бъде направено чрез развитие на апроксимиращата функция $F_a(\eta) = (1 - \eta)^n$ като сходящ степен ред (и използване на крайна сума от него), а именно

$$F_a(\eta) = (1 - \eta)^n \approx \sum_{j=0}^{\infty} m_j \eta^j, \quad m_j = \frac{F_a^{(j)}(0)}{\Gamma(j + 1)} \quad (28a,b)$$

Сега прилагайки, дробното диференциране (с RL производна към (28a) (виж [40]–стр. 70) получаваме

$$\frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} = {}_{RL}D_x^\beta \approx \eta^{-\beta} \sum_{j=0}^K \frac{m_j}{\Gamma(j-\beta+1)} \eta^j \quad (29)$$

В същия контекст, ако се използва производна на Caputo, резултатът е

$$\frac{\partial^\beta F_a(\eta)}{\partial \eta^\beta} = {}_CD_x^\beta \approx \sum_{j=1}^K \frac{m_j}{\Gamma(j-\beta+1)} \eta^{j-\beta} \quad (30)$$

т.е. разликата е само в първият член на реда.

Интегрирането на (29) от 0 до 1 позволява да се получи апроксимация на $\Phi_0(n, \beta)$

$$\Phi_0(n, \alpha, \beta, \eta) \approx \sum_{j=0}^K \frac{m_j}{\Gamma(2+j-\beta)} \quad (31)$$

Аналогично ,

$$\Phi_1(n, \alpha, \beta, \eta) = \sum_{j=0}^K \frac{m_j}{(j-\beta+\alpha+1)\Gamma(j-\beta+1)} \quad (32)$$

И в резултат получаваме, че

$$\Psi(n, \alpha, \beta) = \frac{\sum_{j=0}^K \frac{m_j}{(j-\beta+\alpha+1)\Gamma(j-\beta+1)}}{\sum_{j=0}^K \frac{m_j}{\Gamma(2+j-\beta)}} \quad (33)$$

2.5. Ограничения за експонентата на апроксимиращия профил и граници на вариация

2.5.1. Функция на остатъка и ограничения върху експонентата n дефинирани на границите на дифузионния слой

Експонентата n на апроксимиращия профил е единствения параметър, който не може

да се определи от граничните условия [41,45] и следователно трябва да се търсят допълнителни ограничения. Функцията на остатъчната грешка на уравнение (1a), при използване на $u_a(x, t)$ е

$$R(u_a(x, t)) = \frac{\partial u_a(x, t)}{\partial t} - D_\beta(x) \frac{\partial^\beta u_a(x, t)}{\partial x^\beta} \quad (34)$$

За $x=0$ ($\eta=0$) от (34) получаваме

$$R(u_a(0, t)) = 0 \text{ за всяко } n. \text{ Следователно, на тази}$$

граница не могат да се дефинират допълнителни ограничения. От условието, за $x \rightarrow \delta$ следва, че дифузионното уравнение е в сила при $n > 2$ (виж същия анализ в Глава 2.5)

2.5.2. Брой на членовете в ограничените редове апроксимиращи ${}_{RL}\Phi_0(n, \beta)$, ${}_{RL}\Phi_1(n, \beta)$ и $\Psi(n, \alpha, \beta)$: допълнителни ограничения за експонентата n

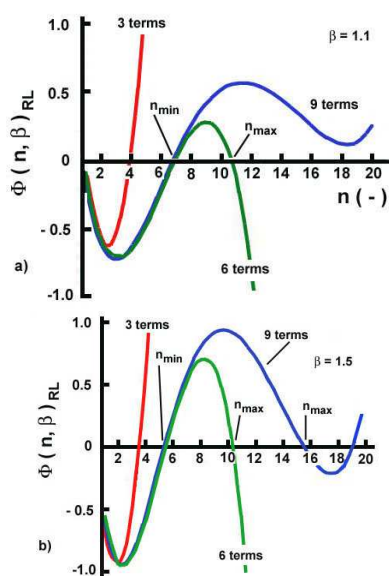
Изразът за дълбочината на проникване съдържа членовете $\Phi_0(n, \alpha, \beta)$, $\Phi_1(n, \alpha, \beta)$ и $\Psi(n, \alpha, \beta)$, и следователно възникват няколко въпроса :

- Коя е минималната стойност на n , за дадени α и β , която осигурява $\Phi_0(n, \beta) > 0$ и $\Phi_1(n, \beta) > 0$, а следователно и $\Psi(n, \alpha, \beta) > 0$, защото стойността на δ е положителна по природа (since the value of δ is positive by nature)?
- Освен това, колко члена от сходящите редове апроксимиращи $\Phi_0(n, \alpha, \beta)$ и $\Phi_1(n, \alpha, \beta)$ трябва да се взимат при изчисленията?

Отговорите на тези въпроси са показани

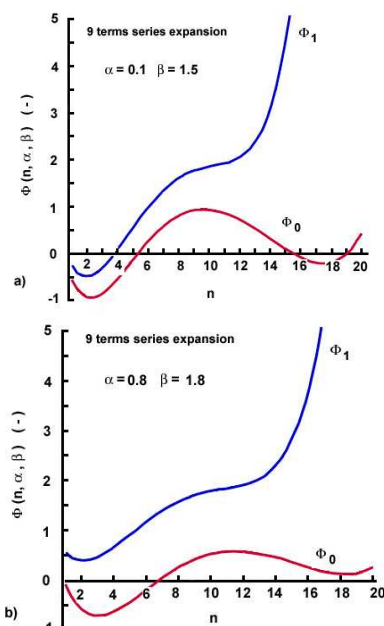
на Фиг. 1a,b за случая на ${}_{RL}\Phi_0(\alpha=0, n, \beta)$, отнасящи се за резултатите представени в [42]

(Глава 2.5) когато $D_{\beta 0} = const.$, където беше установено, че 9 члена от реда са достатъчни (същият факт беше установен и в [43] (Глава 2.6) за $D_{\beta} = D_{\beta 0} x^{\alpha}$). Графиките сочат, че $\Phi_0(n, \alpha, \beta) > 0$ в широк интервал на вариации на n , но намалява с увеличаване на стойността на β . Освен това, ние обръщаме внимание на факта, че минимумите на n осигуряващи позитивни стойности на $\Phi_0(n, \beta)$ са ограничени в интервала $n_{\min} < n < n_{\max}$ (виж Фиг. 1a,b).

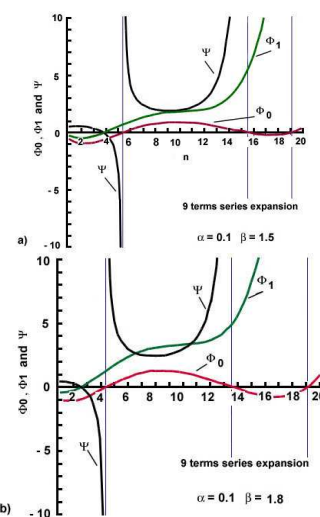


Фиг.1 Влияние на експонентата n върху вариациите на $\Phi_0(n, \alpha, \beta)$ и броят на членовете на сходящия ред апроксимиращ приближения профил. Два случая с различни дробни порядъци : а) $\beta = 1$; б) $\beta = 1.5$

Тези оценки позволяват да се дефинира приблизително интервала на стойности, където трябва да се търси оптималното стойност на експонентата n осигуряващи минимум на функцията на остатъка.



Фиг.2. Ефект на експонентата n върху вариациите на $\Phi_0(n, \alpha, \beta)$ и $\Phi_1(n, \alpha, \beta)$, а също и на броя на членовете на сходящия ред апроксимиращ приближения профил за два случая с различни дробни порядъци: а) $\alpha = 0.1$ и $\beta = 1.1$; б) $\alpha = 0.8$ и $\beta = 1.8$

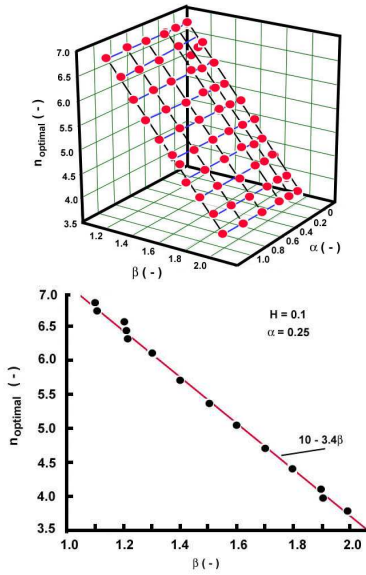


Фиг.3. Ефект на експонентата n върху вариациите на $\Phi_0(n, \alpha, \beta)$, $\Phi_1(n, \alpha, \beta)$ и $\Psi(n, \alpha, \beta)$ за апроксимация на параболичния профил чрез 9 члена на сходящ се степенен ред. Четири различни комбинации на експонентата α и дробния порядък β . а) $\alpha = 0.1$ и $\beta = 1.5$; б) $\alpha = 0.1$ и $\beta = 1.8$;

2.6. Средноквадратична грешка на апроксимация и оптимални експоненти на приближените решения

Ако приложим критерият на Langford [52] за случай на интегрално решение, то трябва да е изпълнено условието

$$E_L(n, \alpha, \beta, t) = \int_0^\delta \left[\frac{\partial u_a}{\partial t} - D_\beta(x^\alpha) \frac{\partial^\beta u_a}{\partial x^\beta} \right]^2 dx \rightarrow \min \quad (35)$$



Фиг.4. Оптимални експоненти на апроксимация параболчен профил определени чрез минимизация на средноквадратичната грешка:

- Тримерна диаграма на функционалната връзка $n_{opt} = f(\alpha, \beta)$. Случай за ${}_s H_r = 1.0$.
- Представяне на функционалната връзка Корелация $n_{opt} = f(\beta)$ чрез линейна зависимост. Случай за $\alpha = 0.25$ и ${}_s H_r = 0.1$.

Поради инвариантността на n_{opt} по отношение на експонентата α и ${}_s H_r$, тази корелация е валидна за цялата област на вариации на параметрите свързани с разглеждания проблем.

Стойностите на оптималните експоненти n_{opt} показват, че са почти независими от α и ${}_s H_r$, но намаляват с увеличаване на дробния порядък β , както е показано на Фиг.4b (същото поведение се наблюдава и в [43] при $D_\beta(x) = D_{\beta 0} x^\alpha$). Този резултат може да се свърже със слабото влияние на втория член (в квадратните скоби) на изразите за δ_1 и δ_2 , който е пропорционален на ${}_s H_r$ и $\Psi(n, \alpha, \beta)$; които от своя страна (в границите на вариация на α и β) имат пренебрежими ефекти върху дебелината на дифузионния слой. В този контекст, зависимостта на n_{opt} от β е практически линейна, както е показано на Фиг.4с.

2.7. Числени експерименти и анализи

2.7.1. Двумерни профили и класификация на режимите

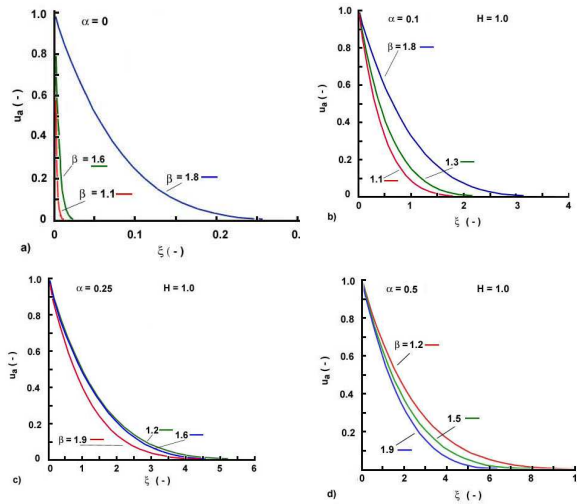
Приближените решения, представени като функция на автомоделната променлива ξ_1 , са показани на Фиг.5 и Фиг.6.

Средноквадратичното преместване $\langle x^2 \rangle$ се дефинира като [53]

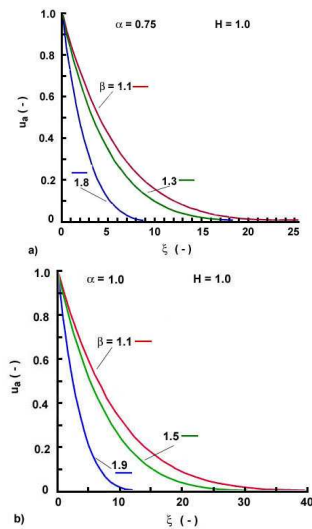
$$\langle x^2 \rangle = \int_0^\delta x^2 u(x, t) dx \propto t^{\frac{2}{d_w}} \quad (36)$$

С използване на апроксимация профил се получава, че [43]

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^\delta x^2 \left(1 - \frac{x}{\delta} \right)^n dx = \frac{2\delta^2}{(n+1)(n+2)} \equiv t^{\frac{2}{d_w}} \quad (37)$$



Фиг.5. Приблизени двумерни профили. Ситуации когато подреждането на профилите по дължина на абсцисата следва намаляването на дробния порядък β и за интервала $0 \leq \alpha \leq 0.5$. Случаите съответствуват на междинен и турбулентен механизъм на пренос (виж коментарите в текста). За всички случаи $H_r = 1.0$. а) $\alpha = 0$; б) $\alpha = 0.1$; в) $\alpha = 0.25$; д) $\alpha = 0.5$.



Фиг.6. Приблизени двумерни профили. Ситуации когато подреждането на профилите по дължина на абсцисата не следват точно намаляването на дробния порядък β и съответстващи на интервала $0.75 \leq \alpha \leq 1.0$, което е почти линейна връзка $D_{\beta 0}(x) = f(x)$ (виж коментарите в текста). Случай за $H_r = 1.0$. а) $\alpha = 0.75$; б) $\alpha = 1.0$;

Следователно, от изразите за $\delta(t)$ ние получаваме, че $\langle x^2 \rangle \equiv \delta^2 \equiv t^{2/d_w}$, а от у-ние (25) и у-ние. (28) се вижда, че $\delta_1 \equiv t^{2/\beta}$ и $\delta_2 \equiv t^{2/(\beta-\alpha)}$, съответно. Важно е да се обърне внимание на факта, че независимо от конструкциите на изразите за δ_1 и δ_2 , дълбочината на проникване на дифузанта е една и съща защото е физически дефинирана величина, и следователно $\delta_1 = \delta_2 = \delta$.

Тъй като потенциално степенната зависимост е адитивна функция на два прости случая, би трябвало да се очаква, че техните специфични характеристики ще се проявят в разпределението на двумерните профили по дължината на абсцисата (като функция на променливата ξ). Графиките представени на Фиг. 5 и Фиг. 6 ясно демонстрират ефекта на β в подреждането, от ляво на дясно, но без видим ефект на експонентата α , и следователно трябва да търсим отговора на въпроса: Защо редът на подреждане на профилите се сменя от двете страни на точката $\beta - \alpha = 1$? Отговорът на този въпрос може да бъде даден, ако се използва алтернативната форма $\delta_2 \equiv t^{2/(\beta-\alpha)}$.

За ситуацията $(\beta - \alpha) < 2$, която обхваща всички случаи разглеждани тук, ние имаме *усилена дифузия (enhanced diffusion)* със следните подслучаи [53,54], а по-точно:

За $1 < (\beta - \alpha) < 2$ транспортният режим е *междинен (intermediate)*, за $(\beta - \alpha) = 1$ имаме *балистичен пренос (ballistic transport)*, а за

случаите когато $(\beta - \alpha) < 1$ преносът е *турбулентен* (turbulent transport).

Ако използваме тези оценките (**виж пълния анализ в дисертацията**) можем да кажем, че с увеличаване на стойността на α процесът сменя своя характер от *междинен* към *турбулентен* и обратно. В това изследване имаме два случая съответстващи на граничната ситуация $(\beta - \alpha) = 1$. Както беше коментирано по-рано, в тези случаи фронтът се движи с постоянна скорост.

ИЗВОДИ

Тази глава разглежда приближено аналитично решение на задача с начални условия в случай на пространствено-дробен диференциален дифузен модел чрез синергетична комбинация на интегрален подход, който на практика решава проблема чрез двуточков метод (two-point method), и метода на най-малките квадрати (the least-squares approach), позволяващ да се определи оптималната експонента на апроксимиращия профил. По-точно, функционалната връзка на фронта на решението, наричан тук *дълбочина на дифузионно проникване* (penetration depth) и *дебелина на дифузионния слой* се получава чрез интегралния метод, прилагайки еднократно интегриране. Рафинирането (прецизирането) на приближеното решение, т.е. определянето на оптималната експонента използва метода на най-малките квадрати, чрез минимизация на остатъчната функция на модела. Освен това, използвания апроксимиращ профил позволява апроксимация чрез сходящ степен ред, позволяващ успешно да се приложат както дробното

диференциране така и интегрирането наложено от интегралния метод.

Полученото решение ясно демонстрира, че реципрочната стойност на разликата между дробния порядък β и пространствената експонента на дифузионния коефициент α , контролира дифузионния процес и определя преходите от субдифузионен към супердифузионен механизъм на пренос.

Оптималната експонента на приближения профил е практически независима от пространствената експонента на дифузионния коефициент α , но намалява с нарастване на дробния порядък β като демонстрира почти линейна зависимост. Триммерното представяне на приближените решения позволява ясно да се демонстрира ефекта на разликата $(\beta - \alpha)$. Освен това, потенциално степенната функционална зависимост на дифузионния коефициент от пространствената координата, предложен в тази работа, позволява да се дефинира дробно число на Фурие. Това позволява да се види ефекта на дробното число на Фурие и развитието на решението за малки, умерени и големи времена.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Trujillo, J., Fractional models: Sub and super-diffusive, and undifferentiable solutions, In: B. H. V.Topping, G. Montero, and R.Montenegro (Eds), *Innovation in Engineering Computational Technology*, Sax-Coburg Publ., Stirling, UK, 2006, pp. 371–402.
- [2] Nigmatullin, R.R., The realization of the generalized transfer equation in a medium with fractal geometry, *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, 133 (1986), 1, 425–430.
- [3] Bakunin ,O.G., Description of the Anomalous Diffusion of Fast Electrons by a Kinetic Equation with a Fractional Spatial Derivative, *Plasma*

- Physics Reports*, Vol. 30, No. 4, 2004, pp. 338–342.
- [4] Bakunin O.G., Diffusion Equations and Turbulent Transport, *Plasma Physics Reports*, (2003),11, pp. 955–970.
- [5] Luchko, Yu, Srivastava,H.M., The exact solution of certain differential equations of fractional order by using operational calculus, *Comp. Math. Appl.*, 29 (1995),8, 73-85.
- [6] He,J-H., Approximate analytical solution for seepage flow with fractional derivatives in porous media, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* , 167 (1998),1-2, 57-68.
- [7] Molliq, R.Y., Noorani, M. S. M., Hashim,I., Variational Iteration Method for Fractional Heat- and Wave-Like Equations, *Nonlinear Anal., Real World Appl.*, 10 (2009), 3, pp. 1854–1869..
- [8] Nakagawa, J. ,Sakamoto,K.,Yamamoto, M., Overview to mathematical analysis for fractional diffusion equations–new mathematical aspects motivated by industrial collaboration, *J. Math-for-Indust.* , 2(2010A- 10) 99-108 .
- [9] Das, S., Gupta, P.K., Ghosh, P., An approximate analytical solution of Nonlinear Fractional Diffusion Equation, *Appl. Math.Model.*,35 (2011) , 8, 4071-4076.
- [10] Wu, GC: Variational iteration method for solving the time-fractional diffusion equations in porous medium *Chin. Phys. B.* , 21, (2012a) , 22, Article ID 120504 ; DOI: 10.1088/1674-1056/21/12/120504
- [11] G.-C. Wu, Applications of the Variational Iteration Method to Fractional Diffusion Equations: Local versus Nonlocal Ones, *Int. Rev. Chem.Eng.*, 4(2012b),5,505-510.
- [12] G.-C. Wu, D.Baleanu, Variational iteration method for fractional calculus - a universal approach by Laplace transform, *Advances in Difference Equations*, 2013,2013:18; doi:10.1186/1687-1847-2013-18
- [13] Liu F, Shen S, Anh V, Turner I. Analysis of a discrete non-Markovian random walk approximation for the time fractional diffusion equation. *ANZIAM J.* , 46 (2004), E, pp.488–504.
- [14] Liu F, Zhuang P, Anh, V, Turner I, Burrage K. Stability and convergence of the difference methods for the space-time fractional advection-diffusion equation. *Appl Math Comput.* , 191 (2007), 1, pp. 12–20.
- [15] Zhuang P, Liu F. Implicit difference approximation for the time fractional diffusion equation. *J Appl Math Comput.* , 22 (2006),3, pp. 87–99.
- [16] Meerschaert MM, Tadjeran C. Finite difference approximations for two-sided space-fractional partial differential equations. *Appl Numer Math.* ,56 (2006),1,pp.80–90.
- [17] Basu T S, Wang H. A fast second-order finite difference method for space-fractional diffusion equations. *Int J Numer Anal Mod.*,9 (2012),5, pp. 658–666
- [18] Podlubny, I, *Fractional Differential Equations*, Academic Press, New York, 1999
- [19] Ervin,V.J., Heur, N., Roop, J., Numerical approximation of a time dependent, nonlinear , spacefractional diffusion equation, *SIAM J. Num Anal.* , 45 (2008),2, pp.572-591.
- [20] Li, C.P., Zhao, Z.G., Chen, Y.Q., Numerical approximation of nonlinear fractional differential equations with subdiffusion and superdiffusion, *Comp.Math. appl.*, 62 (2011),3, pp.855-875.
- [21] Sapor, A., Corneti, P., Carpinteri, A., Diffusion problems on fractional nonlocal media, *Centr. Eur. J. Phys.*, 11 (2013),10, pp. 1255-1261.
- [22] El-Kady, M., El-Sayed, S.M., Salem, H.S., S.E.El-Gendi ,Nodal Galerkin method for solving linear and nonlinear partial \fractional space equations, *Int. J. Latest Res. Sci. Technol.* , 2(2013),6,pp. 10-17.
- [23] Zheng, Y., Zhao, Z., A fully discrete Galerkin method for a nonlinear space-fractional diffusion equation, *math. Problems in Engineering*, (2011) Article 171620, 20 pages,
- [24] Saadatmandi, A., Deghan, M., A tau approach for solution of the space fractional diffusion equation, *Comp. Math. Appl.*, 62 (2011), 3, pp.1135-1142.
- [25] Nie, N., Huang, J., Wang, W., tTang, Y., Solving spatial-fractional partial differential diffusion equations by spectral method., *J. Stat. Comp. Sim.* , 84 (2014),6,pp.1173-1189.
- [26] Ray, S.S, A new approach for the application of Adomian decomposition method for the solution of fractional space diffusion equation with insulated ends, *Appl. Math. Model.* 202 (2008),2, pp. 544-549.
- [27] Ray, S.S, Analytical solution for the space fractional diffusion equation by two-step Adomian decomposition method, *Comp.Nonlinear Sci. Num. Simul.*, 14 (2009), 4, pp. 1295-1306.
- [28] Ray, S.S., Chaudhuri,K.S. Bera,R.K. Application of modified decomposition method for the analytical solution of space fractional diffusion equation, *Appl. Math. Comput.*, 196 (2008), 1, pp.294-302.
- [29] Huang, F., Liu,F. The space-time fractional diffusion equation with Caputo derivatives, *J.Appl. Math & Computing*, 19 (2005), 1-2, [30]Huang, F., Liu, The fundamental solution of the space-time fractional advection-diffusion equation, *J.Appl. Math & Computing*, 19 (2005), 1-2, pp. 339-350.
- [31] Aguilar, J.F.G., Hernadez, M.M., Space-time fractional diffusion-advection equation with Caputo derivative, *Abstract and Applied*

- Analysis*, 2014, Article ID 283019, 8 pages. Doi: 10.1155/2014/283019
- [32] Fabre, A., Hristov, J., On the integral-balance approach to the transient heat conduction with linearly temperature-dependent thermal diffusivity, *Heat Mass Transfer*, 53 (2017), pp. 177–204.
- [33] Cobble M.H. Non-linear heat transfer in solids in orthogonal coordinate systems. *Int. J. Non-linear Mech.*, 2 (4) (1967) 417–4126.
- [34] Sucec J., Hedge S., Transient conduction in slab with temperature dependent thermal conductivity. *Transaction of ASME*, 100 (1) (1978) 172–174.
- [35] Lin S.H. Transient heat conduction with temperature-dependent thermal conductivity by the orthogonal collocation method. *Lett. Heat Mass Transfer*, 5 (1) (1978) 29–39.
- [36] Noda N., Thermal stresses in materials with temperature dependent properties, IN: G.A. Schneider, G., Petzow (Eds.), *Thermal shock and thermal fatigue behaviour of advanced ceramics*, 15–26, (1993), Kluwer Academic Publ.
- [37] Goodman, T.R., Application of Integral Methods to Transient Nonlinear Heat Transfer, IN: T. F. Irvine and J. P. Hartnett (Eds.), *Advances in Heat Transfer*, 1 (1964), Academic Press, San Diego, CA, pp. 51–122.
- [38] J. Hristov, The heat-balance integral method by a parabolic profile with unspecified exponent: Analysis and benchmark exercises. *Therm. Sci.*, 13 (2009), 2, 22–48.
- [39] Hristov, J., Heat-Balance Integral to Fractional (Half-Time) Heat Diffusion Sub-Model, *Thermal Science* 14 (2010), 2, 291–316.
- [40] Hristov, J., Approximate Solutions to Fractional Subdiffusion Equations: The heat-balance integral method, *Europ. Phys. J.-ST*, 193 (2011), 229–243.
- [41] Hristov, J., Approximate solutions to time-fractional models by integral balance approach, IN: C. Cattani, H.M. Srivastava, Xia-Jun Yang (Eds.), *Fractional Dynamics*, De Gruyter Open, Berlin, 2015, pp. 78–109.
- [42] Hristov J., An approximate solution to the transient space-fractional diffusion equation: integral-balance approach, optimization problems and analyzes, *Thermal Science*, 21 (2017), 1A, pp. 309–321.
- [43] Hristov J., Transient space-fractional diffusion with a power-law superdiffusivity: Approximate integral-balance approach, *Fundamenta Informaticae*, 151 (2017), 1–4, pp. 371–388
- [44] Oldham, K.B., Spanier, J., *The fractional Calculus*, Academic Press, New York, USA, 1974.
- [45] Hristov J., Double Integral-Balance Method to the Fractional Subdiffusion Equation: Approximate solutions, optimization problems to be resolved and numerical simulations, *J. Vibration and Control*, DOI: 10.1177/1077546315622773
- [46] Hamed, S., Lebedeff, S.A., Application of the integral method to heat conduction in nonhomogeneous media, *J. Heat Transfer*, 97 (1975), 2, pp 304–305 ; doi:10.1115/1.3450363.
- [47] Voller, V.R., Analytical models of solidification phenomena, *Trans. Indian Inst. Metals*, 62(2009), 4–5, pp. 279–283.
- [48] Liu, G., Si, B.C., Analytical modeling of one-dimensional diffusion in layered systems with position dependent diffusion coefficients, *Adv. Water. Res.*, 31 (2008), 2, 251–168.
- [48] Kassab, A.J., Divo, E., A generalized boundary integral equation for isotropic heat conduction spatially varying thermal conductivity, *Eng. Anal. Boundary Elements* 18 (1996), 4, pp. 273–286; doi:10.1016/S0955-7997(96)00057-4
- [50] Goharkhah, M., Amiri, S. and Shokouhmand, H., Effect of spatial variation of thermal conductivity on non-Fourier heat conduction in a finite slab, *J. Mech. Sci. Technol.* 23 (2009), 12, 3393–3398;
- [51] Pachepsky, Y., Timlin, D., Water transport in soils as in fractal media, *Journal of Hydrology*, 204 (1998), 1–4, pp. 98–107
- [52] Langford, D., The heat balance integral method, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 16 (1973), 12, pp. 2424–2428.
- [53] Vlad M.O., Metzler R., Nonnenmacher T.F., Mackey M.C., Universality classes for asymptotic behavior of relaxation processes in systems with dynamical disorder: Dynamical generalization of stretched exponentials, *J. Math. Phys.*, 37 (1996), 5, pp. 2279–2301
- [54] Baumann G., Sudland N., Nonnenmacher T.F., Anomalous relaxation and diffusion processes in complex systems, *Transp. Theory and Stat Phys*, 29 (2000), 1–2, pp. 151–171.
- [55] K.S.Fa, E.K.Lenzi, Time-fractional diffusion equation with time dependent diffusion coefficient. *Physica A*, 2005, 72: article 011107 . doi:10.1103/PhysRevE.72.011107.
- [56] K.S.Fa, E.K.Lenzi, Power law diffusion coefficient and anomalous diffusion: Analysis of solutions and the first passage time, *Physical Review E*, 2003, 67: article 061105, doi: 10.1103/PhysRevE.67.061105.

ГЛАВА 2.8

УНИФИЦИРАНО НЕЛИНЕЙНО ДРОБНО
ДИФЕРЕНЦИАЛНО УРАВНЕНИЕ*
ЗА ДИФУЗИОННО КОНТРОЛИРАНА
АДСОРБЦИЯ НА ПОВЪРХНОСТНО
АКТИВНИ ВЕЩЕСТВА: Преценка и ново
решение на проблема на Ward-Tordai

Тази глава представя преценка на известното уравнение на Ward-Tordai описващо равновесието на повърхностно активни вещества на границата въздух/течност при наличието на дифузионен контрол. Новият извод е изцяло в светлината на дробно-диференциалното смятане. Унифицираният подход демонстрира, че това уравнение може ясно да се преформулира като нелинейно обикновено дробно диференциално, по време, уравнение от порядък $\frac{1}{2}$. Представеното изследване демонстрира формулиране на уравнението за случаи с различни изотерми. Показани са просто решение с изотерма на Хенри и дискусия за задачата Коши, включваща изотермата на Фрьондлих.

1. Въведение

Повърхностно активните вещества (сърфактанти) са широко разпространени във водни системи и се използват като почистващи, омекрящи, диспергиращи и стабилизиращи агенти, смазващи вещества, стабилизатори на пени, катализатори и много други роли, сред които стабилизатори на фармацевтични, козметични и агрохимични продукти [1,2,3,4]. В тези системи молекулите се стремят да заемат позиции във флуида, където са налице много сили на привличане от различни посоки, при които се

достигат локални динамични равновесия. За молекулите позиционирани на междуфазната повърхност, обаче, съществуват сили насочени към обема на флуида, които не са балансирани и действат в обратна посока (навътре от повърхността на флуида). В резултат на това, флуидът се стреми да минимизира свободната си повърхност, съпротивлявайки се на нейното разширение. Това кохезивно поведение може да бъде количествено измерено като сила за единица дължина от междуфазната повърхност, позната като *повърхностно напрежение*. Динамиката на повърхностното напрежение зависи от количеството молекули на сърфактанта акумулирани (адсорбирани) на междуфазната повърхност. Класическото уравнение на Ward and Tordai (1946) [5] описва преходния процес на повърхностна адсорбция на сърфактант при наличие на дифузионен контрол от страна на флуида, в посока на междуфазната повърхност флуид-въздух. Тази глава (и поддържащата публикация) фокусира вниманието върху преценка на *уравнението на Ward-Tordai и унифицирано формулиране на нелинейно уравнение на адсорбция, чрез директен подход изцяло в светлината на дробното диференциално смятане*.

1.1. Физика на процеса

Количеството на сърфактанта, адсорбиран на границата въздух-вода, се изчислява, най-често, индиректно от измерените стойности на повърхностно напрежение [6,7]. Концентрацията на сърфактанта в обема на флуида C_0 и негово равновесно повърхностно

* Публикувано като: [Hristov J., A Unified Nonlinear Fractional Equation of the Diffusion-Controlled Surfactant Adsorption: Reappraisal and New Solution of the Ward-Tordai Problem, JKUSUS, 28 \(1\) \(2016\), 7-13; DOI: 10.1016/j.jksus.2015.03.008 .](#)

напрежение σ_e , съответстващо на равновесното количество на повърхността G_∞ , са взаимно свързани с уравнението на Gibbs [3]

$$d\sigma_{T,p} = -\sum_i G_{\infty i} d\gamma_i \quad (1a)$$

В уравнение (1a) $d\sigma$ е промяната на повърхностното напрежение на солвента, а $G_{\infty i}$ е повърхностната свръх концентрация на i^{th} компонент от системата и $d\gamma_i$ е промяната в химическия потенциал на i^{th} компонент. Обикновено, повърхностната концентрация на сърфактанта се отбелязва със символа Γ_∞ , но в настоящия анализ се използва Гама функция на Ойлер $\Gamma(\bullet)$ и променяйки символа ние избягваме бъдещи недоразумения. За разтвори съдържащи само един разтворен компонент, уравнението на Gibbs често се представя в следната форма

$$G = -\frac{1}{kRT} \left(\frac{d\sigma}{d \ln C} \right)_T \quad (2)$$

Множителят k в уравнение (2) зависи от броя на веществата образувачи сърфактанта и адсорбиращи се на повърхността: за нейонни или за унивалентни йонни сърфактанти намиращи в излишък в обема на електролита се приема $k=1$, но ако отсъства електролит, тогава $k=2$. Ако повърхностното напрежение е измерено, тогава уравнение (2) може да се използва за определяне на равновесната абсорбционна изотерма $G(t)$.

Съществуват много методи за определяне на повърхностното напрежение включващи измерване на сила [1,3,8]: пластини на Wilhelmy [4,9], пръстен на du Nouy [4], чрез формата на

окачена капка (pendant drop) [10], или чрез измерване на налягане (maximum bubble pressure) [11]. В зависимост от абсорбционната изотерма на повърхността, връзката между повърхностното напрежение и количеството адсорбиран сърфактант се дава чрез съответно *уравнение на състоянието* [12]; примери са показани в Таблица 1.

Ако в началото повърхностна е чиста, така че при започване на процеса на адсорбция имаме $G_0 = 0$ за $t = 0$, то тогава повърхностното напрежение е равно на това на разтворителя σ_0 . В този контекст, нека разгледаме воден разтвор на сърфактант, които е в равновесие с неговата повърхностна концентрация на границата въздух-вода. Концентрацията на сърфактанта C_0 и съответното равновесно повърхностно напрежение σ_e съответствуват на равновесна концентрация G_∞ , и са свързани функционално чрез уравнението на Gibbs (2). Ако системата е неравновесна и се стреми към равновесно състояние, то тогава молекулите на сърфактанта ще бъдат транспортирани към повърхността чрез дифузия [5,13,14,15,16,17,18].

1.2. Уравнение на Ward-Tordai: на-често срещан подход

Нека разгледаме *цялостно контролиран от дифузия пренос* през неподвижен флуид [5,13,14,15,19,20] и *мигновена адсорбция* на молекулите на сърфактанта на повърхността. Когато дифузията през обема на течността се приема за линейна, тогава моделът е на Фик, с начални и гранични условия.

Таблица 1. Основи изотерми и уравнения на състоянието използвани при анализа на динамиката на повърхностното напрежение (изразени чрез термините използвани в тази глава). Според In accordance with: Chang and Frances [22] , Eastoe and Dalton [12] и Li et al.[20]

	Изотерма	Уравнение на състоянието
Henry	$G = K_H C_{s0}$	$\sigma - \sigma_0 = kRTG$
Langmuir	$G(t) = G_{\infty} \frac{aC_{s0}}{1 + bC_{s0}}$	$\sigma - \sigma_0 = -kRTG_{\infty} \ln \left(1 - \frac{G}{G_{\infty}} \right)$
Frumkin	$C_{s0} = \frac{1}{K_F} \frac{G(t)}{G(t) - G_{\infty}} \exp \left[-\beta \left(\frac{G(t)}{G_{\infty}} \right) \right]$	$\sigma - \sigma_0 = -kRTG_{\infty} \ln \left(1 - \frac{G}{G_{\infty}} \right) - \frac{kRT}{2} G_{\infty} \left(\frac{G}{G_{\infty}} \right)^2$
Freundlich	$G(t) = k_f (C_{s0})^{\frac{1}{N}}$	$\sigma - \sigma_0 = kNRTG$
Volmer	$C_{s0} = K_V \left(\frac{G}{G_{\infty} - G} \right) \exp \left(\frac{G}{G_{\infty} - G} \right)$	$\sigma - \sigma_0 = kRT \left(\frac{G_{\infty}^2}{G_{\infty} - G} \right)$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_0 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (3a)$$

$$C(x, t) \rightarrow C_0, \quad x \rightarrow \infty \quad C(0, t) = C_{s0} \quad (4)$$

Решението на модела (3) и наложените начални и гранични условия за $t \rightarrow 0$ (**малки времена**) е [5,13,17,18,20]

$$G(t) = 2C_0 \frac{\sqrt{D}}{\sqrt{\pi}} \sqrt{t} - \frac{\sqrt{D}}{\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{C_{s0}(\tau)}{(t-\tau)^{1/2}} d\tau, \quad (5a)$$

$$C_{s0}(t \rightarrow 0) \neq 0$$

Разделяйки двете страни на (4) на G_{∞} получаваме безизмерната форма на уравнението на Ward-Tordai [5]

$$\theta = 2 \frac{C_0}{G_{\infty}} \frac{\sqrt{D}}{\sqrt{\pi}} \sqrt{t} - \frac{1}{G_{\infty}} \frac{\sqrt{D}}{\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{C_{s0}(\tau)}{(t-\tau)^{1/2}} d\tau,$$

$$\theta = G(t)/G_{\infty}, \quad 0 \leq \theta \leq 1 \quad (5b)$$

Уравнението на Ward-Tordai (5a) често се цитира като решение на модела (3) получено чрез трансформация на Лаплас [19,20,21,22,23], което се отличава от оригиналния подход на Ward and Tordai (1946) и използваното от тях готово решение (underlying solution) на Carslaw [24] (1921), получено с използване на функции на Грийн. Някои специфични моментни ще бъдат коментирани по-долу.

С цел да бъдем коректни, важно е да се отбележи, че Ward и Tordai (1946) [5] започват решението директно от резултата получен от Carslaw [24] за нестационарна дифузия на топлина, задача, която е аналогична на модела (3), с използване на конволюционен интеграл (като този в уравнение 5a). След това, търсейки израз за градиента на под-повърхностната концентрация (subsurface concentration) $(\partial C / \partial x)_{x=0}$ чрез решението на Carslaw [24], Ward и Tordai прилагат теоремата на Маклорен. В резултат на това градиентът на под-повърхностната концентрация се представя като

$$\left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)_{x=0} = F(t) - \frac{1}{2\sqrt{\pi D}} \int_0^t \frac{\phi(z)}{\sqrt{t-z}} dz \quad (6a)$$

Функцията $\phi(t)$ съответствува на повърхностната концентрация в термини използвани от Ward и Tordai

Ward и Tordai представят дясната страна на (6a) като $F(t) = \Gamma(1/2) D^{-1/2} \phi(t)$ използвайки диференциране и интегриране от дробен порядък (involving differentiation and integration of fractional order (sic!)), без посочване на съответен литературен източник. Тъй като решението изисква да се определи производната по време от $F(t)$, те прилагат оператора $D^1 = d/dz$ (sic!) към $F(t)$, което води до

$$F'(t) = \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{\phi(z)}{\sqrt{t-z}} dz = \Gamma(1/2) D^1 D^{-1/2} \phi(t) =$$

$$= \Gamma(1/2) D^{1/2} \phi(t) = -(1/2) \int_0^t \frac{\phi(z)}{\sqrt{t-z}} dz \quad (6b)$$

Тази стъпка от тяхното решение очевидно използва дробна производна на Riemann-Liouville (производната на Caputo е въведена 25 години по-късно). Следователно, малък елемент от дробното смятане съществува в оригиналната работа на Ward и Tordai [5]. Всички статии цитирани в тази глава (и литературата в тях) атакуват проблема с методи на конвенционално диференциално смятане от цял порядък, което води до трудни за анализ изрази и формули (intractable expressions and formulae). Тази ситуация има просто обяснение: независимо че съществува повече от 300 години, дробното диференциално смятане е най-популярно сред математиците, а не сред учените работещи в областта на инженерната химия, където е приложението на уравнението на Ward-Tordai. До известна степен, присъствието на конволюционен интеграл в оригиналното уравнение на Ward-Tordai е основната трудност в изчислителните процедури [26] и неразбиране на конволюционния интеграл, т.е. *интеграл с памет*.

Първото независимо решение на модела (3) е получено от Sutherland [27] (1952) чрез използване на линейната зависимост $G = \bar{M}C$, където $\bar{M}$ средна стойност дефинирана като $\bar{M} = \frac{1}{C_\infty} \int_0^{C_\infty} \left(\frac{G}{C} \right) dC$, т.е. $G = \bar{M}C$, която е независима от концентрацията.

В този случай моделът, с гранични и начални условия, се преобразува до

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = \frac{D_0}{\bar{M}} \frac{\partial C_s}{\partial x}, \quad x=0, \quad t>0 \quad (7)$$

$$C=0, \quad x=0, \quad t=0, \quad C=C_0, \quad x>0, \quad t=0 \quad (8a,b)$$

Решението е просто (sic!) [27]), а именно

$$\left(\frac{C}{C_0} \right)_{x=0} = 1 - \exp\left(-\frac{D_0 t}{\bar{M}^2} \right) \operatorname{erfc}\left(\frac{\sqrt{D_0 t}}{\bar{M}} \right) \quad (9)$$

Алтернативно, решения използващи рефлексия и линейна суперпозиция са получени независимо от Mysels [14]. Много опити са направени за получаване на уравнението на Ward-

Tordai [19,21,28,29,30,31,32,33,34,] и за решението му в случаи на различни абсорбционни изотерми. Съдържателен преглед на съществуващите модели и възможните аналитични решения е направен от Chang и Frances [22].

Уравнението на Ward-Tordai не е достатъчно да се опише адсорбционния процес на междупазната повърхност въздух-вода, защото съдържа две неизвестни функции $G(t)$ и $C_{s0}(t)$. Всъщност, $C_{s0}(t)$ е функция на θ и функционалната зависимост зависи от равновесната изотерма $E_\theta(\theta)$ описваща процеса на раздела въздух-вода (виж Таблица 1).

Основният проблем при решаване на уравнението на Ward-Tordai е коректното определяне на $G(t)$, който следва от факта, че C_{s0} е включена в конволюционен интеграл със слабо сингулярно ядро зависещо от θ . Ако повърхностната концентрация е известна, независимо от развитието на адсорбционния процес, тогава $G(t)$ може да се изчисли непосредствено [36].

2. НОВ ИЗВОД НА УРАВНЕНИЕТО НА WARD-TORDAI ЧРЕЗ ДРОБНИ ПРОИЗВОДНИ ОТ ПОРЯДЪК 1/2

Сега, ние представяме едно ново, алтернативно, решение на модела (3) чрез инструментите на дробното диференциално смятане, което директно води до уравнението на Ward-Tordai. Транспортът на сърфактанта през обема на флуида към повърхността се описва с уравнение (3a), което може да се представи като [37]

$$\frac{\partial C}{\partial t} - D_0 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} =$$

$$= \left(\frac{\partial^{1/2} C}{\partial t^{1/2}} - \sqrt{D_0} \frac{\partial C}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial^{1/2} C}{\partial t^{1/2}} + \sqrt{D_0} \frac{\partial C}{\partial x} \right) = 0 \quad (10)$$

В израза (10) $\frac{\partial^{1/2}C}{\partial t^{1/2}}$ е дробна по време

производна на Riemann-Liouville (лява RL производна) от порядък $1/2$, дефинирана като

$$\frac{\partial^{1/2}C(t)}{\partial t^{1/2}} = {}_{RL}D_t^{1/2}C(t) = \frac{1}{\Gamma(1/2)} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{C(\tau)}{\sqrt{t-\tau}} d\tau, \quad \Gamma(1/2) = \sqrt{\pi} \quad (11a)$$

От тук нататък, ние ще използваме означението $\partial^{1/2}C/\partial t^{1/2}$ вместо ${}_{RL}D_t^{1/2}C(t)$ за да се избегне смесване със символа на коефициента на дифузия D_0 . В същия смисъл, дробният по време интеграл на Riemann-Liouville се дефинира като

$$\begin{aligned} \frac{\partial^{-1/2}C(t)}{\partial t^{1/2}} &= {}_{RL}D_t^{-1/2}C(t) = \\ &= I^{1/2}C(t) = \frac{1}{\Gamma(1/2)} \int_0^t \frac{C(\tau)}{\sqrt{t-\tau}} d\tau \end{aligned} \quad (11b)$$

В уравнение (10) само вторият множител има физичен смисъл [38] и следователно, дифузията в обема флуида може да се представи чрез дробно дифузионно уравнение от порядък $1/2$, именно

$$\frac{\partial^{1/2}C}{\partial t^{1/2}} = -\sqrt{D_0} \frac{\partial C}{\partial x} \quad (12)$$

Уравнение (12) е еквивалентно на модела от цял порядък в близост до разделителната граница $x = 0$ [37,38]. Концентрацията и градиента във всяка точка от средата [39], а по-точно при $x = 0$, когато $C(x \rightarrow 0) = C_{s0}$, са свързани

$$\frac{\partial^{1/2}C_{s0}}{\partial t^{1/2}} = -\sqrt{D_0} \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)_{x=0} \quad (13)$$

Следователно, ние имаме две свързани уравнения (14a, b)

$$\frac{\partial^{1/2}C_{s0}}{\partial t^{1/2}} = -\sqrt{D_0} \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)_{x=0} \quad (14a)$$

$$\frac{\partial G}{\partial t} = D_0 \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)_{x=0} \quad (14b)$$

Елиминирайки градиента $(\partial C/\partial x)_{x=0}$ получаваме

$$D_0 \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)_{x=0} = -\sqrt{D_0} \frac{\partial^{1/2}C_{s0}}{\partial t^{1/2}} \quad (15a)$$

Тогава, от масовия баланс на повърхността (4) е

$$\frac{\partial G}{\partial t} = -\sqrt{D_0} \frac{\partial^{1/2}C_{s0}}{\partial t^{1/2}} \quad (15b)$$

От (15b) следва, че

$$\frac{\partial G}{\partial t} = -\frac{\sqrt{D_0}}{\sqrt{\pi}} \left[\frac{d}{dt} \int_0^t \frac{C_{s0}(\tau)}{(t-\tau)^{1/2}} d\tau - \frac{C_0}{\sqrt{\pi t}} \right] \quad (16)$$

Това е основното уравнение описваща еволюцията и акумулирането на сърфактант $G(t)$ на междофазната повърхност. Прилагайки оператора $D_t^{-1} = \int_0^t dt$ към двете страни на (16) получаваме

$$G(t) = 2 \frac{C_0 \sqrt{D_0}}{\sqrt{\pi}} \sqrt{t} - \sqrt{D_0} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{C_{s0}(\tau)}{(t-\tau)^{1/2}} d\tau \quad (17a)$$

Това е уравнението на Ward-Tordai (WT) (1946) [5]

За $t \rightarrow 0$, когато $C_{s0}(t) \approx 0$, решението за малки времена [23] се апроксимира като

$$G(t)_{t \rightarrow 0} \approx 2 \frac{C_0 \sqrt{D_0}}{\sqrt{\pi}} \sqrt{t} \quad (17b)$$

Решението за големи времена на (14a,b), а също така и на (17a), за случаи на различни нелинейни функционални зависимости $C_{s0}(t)$, са специфични и трудно разрешими задачи, и някои от тях са коментирани в следващите текстове.

Въпреки това, приближението при $t \rightarrow \infty$ може да се представи като [21,23,40])

$$C_s = C_{s(t \rightarrow \infty)} = \frac{G_\infty - G_0}{\sqrt{\pi D t}} \quad (17c)$$

Определено, новият подход за извод на уравнението на Ward-Tordai, представен в тази глава е директен и прост. Той започва от основния модел (3) и не използва предишни решения на подобни проблеми (does not use underlying solutions of similar problems taken from other sources) взети от други литературни източници. Освен това, решението е получено изцяло с инструментите на дробното диференциално смятане.

3. ФОРМУЛИРАНЕ НА УНИФИЦИРАНО ДРОБНО НЕЛИНЕЙНО УРАВНЕНИЕ

Независимо от факта, че получихме уравнението на Ward-Tordai чрез директен метод, уравнението на абсорбционната изотерма трябва да бъде отчетено, за да бъде завършено решението на проблема. Това уравнение е еквивалентно на уравнението на Ward-Tordai, но сега то има форма, която лесно се „чете“ от тези, които са запознати с дробното диференциално смятане.

Сега, започвайки от уравнение (17a) и отчитайки, че функционалната връзка $C_{s0}[G(t)] \Rightarrow C_{s0}(t) = f[G(t)]$ е адсорбционната изотерма, можем да запишем

$$G(t) = 2 \frac{C_0 \sqrt{D_0}}{\sqrt{\pi}} \sqrt{t} - \sqrt{D_0} {}_{RL}D_t^{-1/2} C_{s0}(t) \quad (18)$$

Следователно, разделяйки двете страни на (17a) с максималното равновесно количество

сърфактант на повърхността G_∞ (the saturation surface excess), и в същото време прилагайки оператора $D^{1/2}$ към двете страни на (17a) получаваме

$$\frac{\partial^{1/2}}{\partial t^{1/2}} \left[\frac{G(t)}{G_\infty} \right] = \left(\frac{C_0}{G_\infty} \right) \sqrt{D_0} - \sqrt{D_0} \left[\frac{C_{s0}(t)}{G(t)} \right] \left[\frac{G(t)}{G_\infty} \right] \quad (19)$$

Въвеждайки безизмерното отношение

$$\theta = G(t)/G_\infty \text{ и функцията } E_\theta = [C_{s0}(t)/G(t)]\theta$$

ние можем да представим (19) в обща форма като

$$\frac{\partial^{1/2}}{\partial t^{1/2}} \theta + B_0 E_\theta = A_0, \quad A_0 = \left(\frac{C_0}{G_\infty} \right) \sqrt{D_0}, \quad B_0 = \sqrt{D_0} \quad (20a,b,c)$$

Функцията $E_\theta = C_{s0}[G(t)/G_\infty]$ зависи от използваната абсорбционна изотерма описваща равновесието. Таблица 2 представя различни версии на уравнение (20a).

4. ПРИМЕРИ

4.1. Изотерма на Хенри

Независимо от факта, че това е най-простия случай, ние ще го използваме, за да демонстрираме как новото уравнение (20a) може да се свърже със съществуващите в литературата решения.

С променливите $G = K_H C_{s0}$ и $C = G/K_H$ получаваме $E_\theta = (C_{s0}/G_\infty)\theta = \theta/K_H$ и

$$\theta = (C_{S0}/G_\infty) K_H. \text{ Тогава уравнение (20a) може}$$

да се представи като

$$\frac{\partial^{1/2}}{\partial t^{1/2}} \theta + B_{H0} \theta = A_{H0}, \quad A_{H0} = A_0, \quad B_{H0} = \frac{\sqrt{D_0}}{K_H} \quad (21)$$

Таблица 2. Дробни диференциални уравнения за случаите на различни изотерми. Унифицирано представяне съгласно с обобщената конструкция на уравнение (20a).

	Уравнения	Коефициенти
Henry	$\frac{\partial^{1/2}}{\partial t^{1/2}} \theta + B_{H0} \theta = A_{H0}$	$A_{H0} = A_0 = \left(\frac{C_0}{G_\infty} \right) \frac{\sqrt{D_0}}{\sqrt{\pi}}, B_{H0} = \frac{B_0}{K_H} = \frac{\sqrt{D_0}}{K_H}$
Langmuir	$\frac{\partial^{1/2}}{\partial t^{1/2}} \theta + B_{L0} \frac{\theta}{1-\theta} = A_0$	$A_{L0} = A_0, B_{L0} = \frac{\sqrt{D_0}}{a}, \text{ for } a = b$
Frumkin	$\frac{\partial^{1/2}}{\partial t^{1/2}} \theta + B_{F0} \frac{\theta}{1-\theta} \exp(-\beta\theta) = A_{F0}$	$A_{F0} = A_0, B_{F0} = \frac{\sqrt{D_0}}{K_F} = \frac{B_0}{K_F}$
Freundlich	$\frac{\partial^{1/2}}{\partial t^{1/2}} \theta + B_{f0} \theta^{\frac{1}{N}} = A_{f0}$	$A_{f0} = A_0, B_{f0} = \frac{\sqrt{D_0}}{(k_f G_\infty)^m} = \frac{B_0}{(k_f G_\infty)^m}, m = \frac{1}{N}$
Volmer	$\frac{\partial^{1/2}}{\partial t^{1/2}} \theta + B_{V0} \left(\frac{1}{1-\theta} \right) \exp\left(\frac{1}{1-\theta} \right) = A_{V0}$	$A_{V0} = A_0$ $B_{V0} = K_V \sqrt{D_0} = K_V B_0$
Общи коефициенти : $A_0 = (C_0/G_\infty) (\sqrt{D_0}/\sqrt{\pi}) = \theta_0 (\sqrt{D_0}/\sqrt{\pi}) [s^{-1/2}]$; $B_0 = \sqrt{D_0} [ms^{-1/2}]$		

4.1.1. Нулеви начални условия

С изходна чиста повърхност, т.е. за $\theta_0 = 0$ и прилагайки трансформацията на Лаплас към уравнение (21), получаваме

$$\theta(t) = \frac{A_0}{B_{H0}} \left[1 - \exp(B_{H0}^2 t) \operatorname{erfc}(B_{H0} \sqrt{t}) \right] \quad (22)$$

Представяйки A_{0H} и B_{0H} чрез константите контролиращи процеса и отчитайки връзката $G_0 = K_H C_0$ получаваме зависимостта

$$\theta(t) = \left(\frac{G_0}{G_\infty} \right) \left[1 - \exp\left(\frac{D_0}{K_H^2} t \right) \operatorname{erfc}\left(\frac{\sqrt{D_0}}{K_H} \sqrt{t} \right) \right] \quad (23)$$

Следователно, ние директно стигнахме до първото известно решение на уравнението на Ward-Tornai получено от Sutherland през 1952 [37] (виж уравнение 9), но без използване на средни концентрации, а именно

$$\frac{G(t)}{G_0} = \left[1 - \exp\left(\frac{D_0}{K_H^2} t \right) \operatorname{erfc}\left(\frac{\sqrt{D_0}}{K_H} \sqrt{t} \right) \right] \quad (24)$$

Дефинирайки характеристичното време на процеса като $\tau_D = K_H^2 / D_0$, можем да запишем уравнение (24) в компактна форма

$$\theta(t) = \left(\frac{G_0}{G_\infty} \right) \left[1 - \exp\left(\frac{t}{\tau_D} \right) \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{t}{\tau_D}} \right) \right] \quad (25)$$

4.1.2. Ненулеви начални условия

Когато минимално количеството сърфактант $\bar{G}_0 \ll G_\infty$ съществува на повърхността, т.е. имаме, че $\theta(0) = \theta_0 = \bar{G}_0 / G_\infty \neq 0$, то производната от порядък 1/2 от излишъка на сърфактант на повърхността е ${}_0D_t^{1/2} \theta - \theta_0 / \sqrt{\pi t}$ [38] и уравнението приема вида

$$\frac{\partial^{1/2}}{\partial t^{1/2}} \theta + B_{H0} \theta = A_{H0} + \frac{\theta_0}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{t}} \quad (26)$$

Решение чрез трансформация на Лаплас приложена към (26) води до

$$\theta(t) = \left(\frac{G_0}{G_\infty} \right) \left[1 - \exp(B_{H0}^2 t) \operatorname{erfc}(B_{H0} \sqrt{t}) \right] + \theta_0 \exp(B_{H0}^2 t) \operatorname{erfc}(B_{H0} \sqrt{t}) \quad (27)$$

За $\theta_0 = 0$ от (27) получаваме решението (25). Вторият член на (27) съответствува на приноса на θ_0 в процеса за малки времена (in short-time processes), защото бързо затихва във времето.

4.1.3 Решение за малки времена

Широко разпространената апроксимация на уравнението на Ward-Tordai, за този случай, е уравнение (17b). Сега, прилагайки трансформацията на Лаплас към решението с нулеви начални условия (22a) ние можем да получим асимптотично разлагане в ред (ограничено до 3 члена за яснота на изложението), а именно

$$\Theta(p)_{p \rightarrow \infty} \approx A_{H0} \left[\left(\frac{1}{p} \right)^{3/2} - B_{H0} \frac{1}{p^2} + B_{H0}^2 \left(\frac{1}{p} \right)^{5/2} + O\left(\frac{1}{p^3} \right) \right] \quad (28a)$$

Обратната трансформация на Лаплас от (28a) дава апроксимацията за малки времена

$$\theta(t)_{t \rightarrow 0} \approx 2A_{H0} \frac{\sqrt{t}}{\sqrt{\pi}} - B_{H0} t + \frac{4}{3\sqrt{\pi}} B_{H0}^2 t^{3/2} \quad (28b)$$

От израза (28b) се вижда, че само първият член съпада с решението (17b). Отчитайки, обаче, че $B_{H0} = \sqrt{D_0}/K_H$ и D_0 са обикновено от порядък $10^{-10} - 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$ [36], то тогава е напълно резонно само първият член на (29b) да има практическа стойност, като по този начин се потвърждава общото правило да се използва апроксимацията (17b).

5. ФОРМУЛИРАНЕ НА ЗАДАЧА НА КОШИ И СЛУЧАЙ НА ИЗОТЕРМА НА ФРЬОНДЛИХ

Определено, оригиналното уравнение на Ward-Tordai (5a) е задача на Коши определяща локално, и по единствен начин, решението на модела (3). Както е коментирано от Baret [13], решенията на (3a) и на уравнението на Ward-Tordai (5a) са, всъщност, две не влизащи в конфликт решения на условията на Коши и условията (3d) (*the compatibility relations between the Cauchy's condition and the condition 3d*).

Нека сега разгледаме линейното дробно диференциално уравнение (20a), с изотерма на Фрьондлх, представено във вида

$$\frac{\partial^{1/2}}{\partial t^{1/2}} \theta + B_{f0} \theta^m = A_{f0}, \quad A_{f0} = A_0, B_{f0} = \frac{\sqrt{D_0}}{(k_f G_\infty)^m} = \frac{B_0}{(k_f G_\infty)^m}, m = \frac{1}{N} \quad (29)$$

За $N = 1$ получаваме линейния случай решен в предишната точка. Специфично за случая на изотерма на Фрьондлх е, че когато $N > 1$ ($m < 1$) имаме изпъкнала изотерма, докато при $N < 1$ ($m > 1$) изотермата е вдлъбната.

Уравнение (30) може да се представи в една по-обща форма [41] (пример 3.3- р 177 в тази книга), а именно

$$D_{a+}^\mu \theta(t) = \lambda (t-a)^\beta [\theta(t)]^m, t > a, m > 0, m \neq 1 \quad (30)$$

с реални $\lambda, \beta \in \mathbb{R} (\lambda \neq 0)$.

Както е доказано от Kilbas et al. [41], ако е изпълнено условието $(\beta + \mu)/(1-m) > -1$ то тогава уравнение (30) има явно решение

$$\theta(t) = \left[\frac{\Gamma(\eta - \mu + 1)}{\lambda \Gamma(\eta + 1)} \right]^{\frac{1}{m-1}} t^{\frac{\mu}{1-m}} \quad (31)$$

Условията наложени на параметрите, когато

$0 < \mu < 1$ (специално за $\mu = 1/2$ отговарящ на

разглеждания проблем) [41] са: $m > 1$,

$-m\mu < \beta < m-1-m\mu$, така че

$-m/2 < 0 < m-1-m/2$. В този случай решението

може да се представи като

$$\theta(t)_{\mu=\frac{1}{2}} = \left[\frac{\Gamma(\eta+1/2)}{\lambda \Gamma(\eta+1)} \right]^{\frac{1}{m-1}} t^{\frac{1}{2(1-m)}}, \quad \eta = \frac{m}{2(m-1)} \quad (32)$$

В допълнение, за $m=2$, като пример, което

съответствува на $N=0.5$ и изпъкнала изотерма на

Фрьондлх, получаваме от $\eta=1$ и решението

(38a) е пропорционално на времето със степен

$1/2$ (simple square-root law of the time), а именно

$$\theta(t)_{\mu=\frac{1}{2}, m=2} = \left[\frac{\Gamma(3/2)}{\lambda \Gamma(2)} \right] t^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{\lambda} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \sqrt{t} \quad (33)$$

ИЗВОДИ

Тази глава представя нов поглед към известното

уравнение на Ward-Tordai изцяло проведен в светлината на дробното диференциално смятане.

Унифицираният подход използван при анализа показва, че уравнението на Ward-Tordai може

ясно да преформулира като нелинейно

обикновено дробно диференциално уравнение от

порядък $1/2$. В допълнение, използваният подход

позволява да се формулират версии за различни

типове изотерми. Показано е директно решение за

случая на изотерма на Хенри. Разгледана е

задачата на Коши и на тази основа е получено, и

дискутирано решение за случая на изотерма на

Фрьондлх.

Литература

- [1] Davies, J.T., Rideal, E.K., *Interfacial Phenomena*; Academic Press, New York (p. 284), 1963.
- [2] Lenzi, M.K.; Cunningham, M.F.; Lima, E.L.; Pinto, J.C., Producing bimodal molecular weight distribution polymer resins using living and conventional free-radical polymerization. *Ind. Eng. Chem. Res.* 44, 2005, pp. 2568-2578.
- [3] Gaines Jr, G.L., 1966. *Insoluble Monolayers at Liquid-Gas Interfaces*. Wiley, New York, 2005.
- [4] Gosh, P., *Colloid and Interface Science*. PHI Learning, New Delhi, 2009.
- [5] Ward, A.F.H., Tordai, L. Time-dependence of boundary tensions in solutions. I. Role of diffusion in time effects, *J. Chem. Phys.*, 14, 1946, pp. 453-461.
- [6] Dudnik, V., Lunkenheimer, K., Dynamic surface tension and adsorption kinetics of nonionic surfactants at the air-water interface. *Langmuir*, 16, 2000, pp. 2802-2807.
- [7] Dannov, K.D., Kolev, V.L., Kralchevsky, P.A., Broze, G., Mehreteab, A., Adsorption kinetics of ionic surfactants after a large initial perturbations, Effect of surface elasticity, *Langmuir*. 16, 2000, pp. 2942-2956.
- [8] Frances, E.I., Basaran, O.A., Chang, C.H., Techniques to measure dynamic surface tension, *Current Opinion in Colloid Interface Sci.*, 1, 1996, pp. 296-303.
- [9] Kwok, D.Y., Neumann, A.W., Contact angle measurement and contact angle interpretation. *Adv. Colloid Interface Sci.*, 81, 1999, pp. 167-249.
- [10] Saad, S.M.I., Policova, Z., Neuman, A.W., Design and accuracy of pendant drop methods for surface tension measurement. *Colloid and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects*, 384, 2011, pp. 442-452.
- [11] Christov, N.C., Danov, K.D., Kralchevsky, P.A., Ananthapadmanabhan, K.P., Lips, A., Maximum bubble pressure method: Universal surface age and transport mechanism in surfactant solutions, *Langmuir*, 22 (2006), pp. 7528-7542.
- [12] Eastoe, J., Dalton, J.S., Dynamic surface tension and adsorption mechanism of surfactants at air-water interface, *Adv. Colloid Interface Sci.*, 85 (2000), pp. 103-144.
- [13] Baret, J.F., Kinetics of adsorption from solution. Role of diffusion and the adsorption-desorption antagonism, *J. Phys. Chem.*, 78 (1968), pp. 2755-2758.
- [14] Mysels, K.J., Diffusion-controlled adsorption kinetics. General solution and some applications, *J. Phys. Chem.* 86 (1982), pp. 4648-4651.

- [15] Li, B., Geeraerts, G., Joos, P., Kinetic equations for transfer-controlled adsorption kinetics, *Colloid and Surfaces A: Physicochem.Eng. Aspects.*, 88 (1994), pp. 251-266.
- [16] Campanelli, J.R., Wang, X., Comments on modelling the diffusion controlled adsorption of surfactants, *Can J. Chem. Eng.* 76 (1998), pp.51-57.
- [17] Liu, J., Messow, U., Diffusion-controlled adsorption kinetics at the air/solution interface. *Colloid Polym. Sci.* 278 (2000), pp. 124-129.
- [18] Liu, J., Li, P., Li, C., Wang, Y., Diffusion-controlled kinetics of aqueous micellar solution at air/solution interface, *Colloid Polym. Sci.* 287 (2009) pp.1083-1088.
- [19] Borwankar, R.P., Wasan,D.T., The kinetics of adsorption of active surface agents at gas-liquid surfaces. *Chem. Eng. Sci.*, 38 (1983) pp. 1637-1649.
- [20] Liu, J., Messow, U., Diffusion-controlled adsorption kinetics at the air/solution interface. *Colloid Polym. Sci.*, 278 (2010), pp. 124-129.
- [21] Hansen, R.S., The theory of diffusion-controlled adsorption kinetics with accompanying evaporation. *J. Phys. Chem.*, 64 (1960), pp. 637-641.
- [22] Chang, C.H., Frances, E.I., Adsorption dynamics of surfactants at the air/water interface: a critical review of mathematical models, data and mechanisms, *Colloid and Surfaces A: Physicochem.Eng. Aspects.*, 100, (1995), pp. 1-45.
- [23] Kralchevsky, P.A., Danov, K.D., Denkov, N.D., Chemical Physics of colloid system and interfaces, IN: Birdi, K.S. (Ed.), *Handbook of surface and colloid chemistry*, 3rd ed., CRC Press, Boca Raton, pp.199- 377, 2008.
- [24] Carslaw, H.S., *Mathematical Theory of Heat conduction*, MacMillan, London, 1921.
- [25] Carslaw, H.S., Jaeger, J.C., *Conduction of heat in solids*. 2nd ed., Oxford University Press, Oxford, 1959.
- [26] Noskov, B.A., Fast adsorption at the liquid-gas interface, *Adv. Colloid Interface Sci.*, 69 (1996), pp. 63- 129.
- [27] Sutherland, K.L., The kinetics of adsorption at liquid interfaces, *Austr. J. Sci. Res.* A5, 1952., pp.683-696.
- [28] Petrov, J.G., Miller, R., On the solution of the diffusional problem in adsorption kinetics. *Colloid Polym. Sci.*, 255 (1977), pp. 669-674.
- [29] Ziller, M., Miller, R., On the solution of diffusion controlled adsorption kinetics by means of orthogonal collocations, *Colloid Polym. Sci.*, 264 (1986), pp. 611-615.
- [30] Miller, R. On the solution of diffusion controlled adsorption kinetics for any adsorption isotherms, *Colloid Polym. Sci.*, 259 (1981), pp. 375-381.
- [31] Chang, H.C., Tsen, C.H., Chang, C.H., A model for simulating the dynamic surface tension behaviour of aqueous surfactant dispersions, *Colloid. Polym. Sci.*, 285(2006), pp. 57-63.
- [32] Fenandez, J.R., Muniz, M.C., Numerical analysis of surfactant dynamics at air-water interface using the Henry isotherm, *J. Math. Chem.*, 49 (2011), pp. 1624-1645.
- [33] Fenandez, J.R., Muniz, M.C., Nunez, C., Numerical behaviour of a linear mixed kinetic-diffusion model for surfactant adsorption at the air-water interface, *J. Math. Chem.*, 50 (2012), pp. 429-438.
- [34] Fenandez, J.R., Muniz, M.C., Nunez, C., A mixed diffusion surfactant model for the Henry isotherm, *J. Math. Anal. Appl.*, 389 (2012), pp. 670-684.
- [35] Linz, P., *Analytical and numerical methods for Volterra equations*, SIAM, Philadelphia, 1985
- [36] Johansen, E.C., Chung, J.B., Chang, C.H., Frances, E.I., Lipid transport to air/water interfaces, *Colloid Surfaces*, 53(1991), pp.117-134.
- [37] Babenko, Yu.I., *Heat-Mass Transfer: Methods for calculation of thermal and diffusional fluxes*. Khimia Publ., Moscow (in Russian), 1984.
- [38] Oldham, K.B., Spanier, J., *The fractional calculus*, Academic press, New York, 1974.
- [39] Agrawal, O. P., Application of Fractional Derivatives in Thermal Analysis of Disk Brakes. *Nonlinear Dynamics*, 38 (2004), pp.191-206.
- [40] Daniel, R., Berg, J.C., Diffusion-controlled adsorption at liquid-air interface: the long-time limit. *J. Colloid Interface Sci.*, 237(2001), pp.294-296.
- [41] Kilbas, A.A., Srivastava, H.M., Trujillo, J.J., *Theory and Applications of Fractional Differential Equations*. Elsevier, Amsterdam, 2006.

ЧАСТ 2

АНОМАЛНИ И НЕЛИНЕЙНИ ДИФУЗИОННИ МОДЕЛИ С ПРОИЗВОДНИ ОТ ДРОБЕН ПОРЯДЪК СЪС СИНГУЛЯРНА ПАМЕТ

ОСНОВНИ РЕЗУЛТАТИ И ПРИНОСИ

Основните резултати получени в изследванията в Част 2 са свързани с получаването на приближени решения на линейни и нелинейни субдифузионни и супердифузионни модели чрез метода на интегралния баланс.

Направен е нов извод на известното уравнение на Ward-Tordai за адсорбция на сърфактанти, изцяло с апарата на дробното диференциално смятане.

1. ОСНОВНИ РЕЗУЛТАТИ

Глава 2.1: Това е първата публикувана статия показваща как метод на интегралния баланс може да се прилага към модели съдържащи интегрални със сингулярна памет.

Глава 2.2 Ясно показва, че метода на интегралния баланс, използващ техниката на двойно интегриране, е напълно приложим при решаване на линейното субдифузионно уравнение, както с производна на Riemann-Liouville така и с производна на Caputo. Показани и дискутирани са няколко подхода за определяне на оптималните експоненти на приближените решения. Приближените решения са сравнени с точните решения на Mainardi.

Глава 2.3 Развива идеята представена в Глава 2.2 и показва приближено аналитично решение на нелинейно дегенериращо субдифузионно уравнение. Показано е ясно влиянието на параметъра на дробния порядък и степенния коефициент на дифузионния коефициент, и като следствие: конкурентното въздействие на субдифузията и дегенериращото дифузионно поведение върху развитието на приближените решения.

Глава 2.4 Тази глава представя приближено интегрално решение на дробно по време дифузионно уравнение, от порядък $0 < \mu < 1$, с коефициент зависещ от времето по степенен закон $e D(t) = D_0 t^\beta$, където $0 < \beta < 1$. Формата на полученото решение, разпространяващо се в полу-безкрайна среда и оценено чрез анализ на вторият момент, позволява да се заключи, че в зависимост от стойността на сумата $(\mu + \beta)$ уравнението моделира субдифузионен пренос ($\mu + \beta < 1$), супердифузионен пренос ($\mu + \beta > 1$) или Гаусова (нормална) дифузия за ($\mu + \beta = 1$). Резултатът потвърждава основният резултат на Fa and Lenzi, че при субдифузионен пренос времето за първо преминаване е безкрайно.

Глава 2.5 Представя приближени аналитични решения на нестационарно дифузионно уравнение с дробна по време пространствена производна на Riemann-Liouville и полубезкрайна област, в случая на задача на Дирихле. Използван е интегрален метод с две основни техники на интегриране: метод с просто (еднократно) интегриране (HBIM) и метод с двойно интегриране (DIM), и концепцията за крайна дълбочина на проникване на дифузанта.

Глава 2.6 Представя приближено аналитично решение за задача с начално условие и дробна по пространство производна на Riemann-Liouville. Пространствената корелация на дифузионния коефициент е представена със степенна функция и се дискутира нейното отношение към възможните режими на бърза и бавна пространствена супердифузия. Основният извод от решенията е, че временното

развитие на фронта на решението е по закона $t^{1/(\beta-\alpha)}$ и дълбочината на проникване на дифузанта контролирана от разликата $(\beta-\alpha)$, средноквадратичното преместване $\langle x^2 \rangle \equiv \delta^2 \equiv t^{2/(\beta-\alpha)}$. Този факт и анализът на поведението на приближените решения позволяват да се оцени ефекта на разликата $(\beta-\alpha)$ върху реда на подреждане на разпределенията (приближени решения) и моделираните транспортни режими.

Глава 2.7 Тази глава разглежда приближено аналитично решение на задача с начални условия в случай на пространствено-дробен диференциален дифузен модел чрез синергетична комбинация на интегрален метод и метод на най-малките квадрати. Полученото решение ясно демонстрира, че реципрочната стойност на разликата между дробния порядък β и пространствената експонента на дифузионния коефициент α , контролира дифузионния процес и определя преходите от субдифузионен към супердифузионен механизъм на пренос. Оптималната експонента на приближения профил е практически независима от пространствената експонента на дифузионния коефициент α , но намалява с нарастване на дробния порядък β , като демонстрира почти линейна зависимост. Потенциално степенната функционална зависимост на дифузионния коефициент от пространствената координата, предложен в тази работа, позволява да се дефинира дробно число на Фурие. Това позволява да се види ефекта на дробното число на Фурие и развитието на решението за малки, умерени и големи времена.

Глава 1.8 Показан е напълно нов извод да уравнението на Ward-Tordai за адсорбция на сърфактанти, изцяло с апарата на дробното диференциално смятане. Основният резултат е формулирането на унифицирано нелинейно дробно диференциално уравнение от порядък $1/2$ моделиращо адсорбция на сърфактанти в режим на дифузионен контрол.

2. ОСНОВНИ ПРИНОСИ

1. Получени са приближени интегрални решения на субдифузионни уравнения с постоянен (Глава 2.2), степенен (Глава 2.3) и зависещ от времето (Глава 2.4) дифузионен коефициент.
2. Получени са приближени интегрални решения на супердифузионни уравнения с постоянен (Глава 2.5), степенен (Глава 2.6) и потенциално степенен (Глава 2.7) дифузионен коефициент.
3. Направен е нов извод на Ward-Tordai е формулирано унифицирано нелинейно дробно диференциално уравнение от порядък $1/2$, моделиращо адсорбция на сърфактанти в режим на дифузионен контрол (Глава 2.8).

Част 3

ДИФУЗИОННИ МОДЕЛИ С НЕСИНГУЛЯРНА ИЗЧЕЗВАЩА ПАМЕТ

Кратко представяне

ЧАСТ 3

ДИФУЗИОННИ МОДЕЛИ С НЕСИНГУЛЯРНА ИЗЧЕЗВАЩА ПАМЕТ

ПРЕДГОВОР

Тази част представя резултати върху дифузионни модели с несингулярна (експоненциална) памет чрез наскоро дефинирания интегрален оператор (производна) на Caputo-Fabrizio. Основната цел на представените изследвания е да се покаже как този дробен интегрален оператор възниква, след начално конституиране на зависимости поток-градиент, чрез постановката (концепция) на Cattaneo чрез интеграл с експоненциална памет. Като следствие от този подход на изследване, една от важните задачи е, да се покаже как се променят конструкциите на дифузионите модели, в сравнение с тези с локални временни производни и доминиращите в момента модели със сингулярна памет.

Това е една нова област, представена в литературата чрез интензивен поток от публикации използващи подхода на формалната фракционализация, с доста противоречиви резултати и интерпретации, а и в много случаи с неясна физическа формулировка. Освен това, след дефинирането на основната идея от Caputo-Fabrizio, през 2015, възникна едно ново направление за дефиниране на нов тип интегрални оператори, които имитират основната дефиниция чрез формална промяна на ядрото. **Във всички тези случаи, подходът е постулиране на производната (интегрален оператор) без предварителен анализ на физичната база изискваща тази формулировка.**

ЧАСТ 3 е организирана по следния начин:

1. Глава 3.1 прави преглед на дефинициите на интегрални оператори (производни), започвайки от базовата дефиниция на Caputo-Fabrizio, с несингулярна памет и техните свойства.

2. Глава 3.2 представя извод на уравнение за нестационарна дифузия, използващ основната постановка на Cattaneo и класическата формулировка на разширената дефиниция на закона на Фурие (Фик) чрез ядро на Jeffrey. В това изследване дефиницията на интегралния оператор на Caputo-Fabrizio (производна по време) възниква естествено в демпфиращ член на дифузионния модел.

3. Глава 3.3 формулира модел пространствена памет, за разлика от класическия подход с временна памет (разгледан в Глава 3.2), като по този начин се дефинира пространствен интегрален оператор (производна) с експоненциално ядро, от тип Caputo, и е решена задачата за стационарна дифузия на

топлинна. Основни резултати са: i) възможността да се получи аналитично решение и да се покаже как дробният параметър деформира профильт отдалечавайки го от класическото решение на Фурие; ii) връзка между геометричния размер на участъка с пространствена памет и дробния параметър на интегралния оператор.

4. Глава 3.4 разглежда извод на уравнението на дробно-диференциално Додсън използващ конститутивен подход и уравнение свързващо потока и градиента чрез интеграл с експоненциална памет, за разлика от изходната, *ad hoc*, формулировка на този модел. Като естествен резултат на този извод е показано как формулировката на Додсън е граничен случай при много големи релаксационни времена. Като следствие от този извод и последващия анализ е формулиран дифузионен модел със сложна памет включваща едновременно релаксационни ефекти за големи и малки времена. Важен резултат на това изследване е дефинирането на функционалната връзка между дробния параметър и дифузионното число на Deborah.

5. Глава 3.5 разглежда, от критична гледна точка, проблема с формалната фракционализация на дивизионното уравнение, когато производната по време в класическия модел на Фурие (Фик) се замени формално с производната (по време) на Caputo-Fabrizio.

6. Глава 3.6 представя анализ на основния проблем: какъв тип памет се моделира чрез експоненциалното ядро използвано в оператора на Caputo-Fabrizio и как новите производни (оператори) кореспондират с реални физични процеси. Това е още обект интензивна дискусия в литературата, така че тази глава дава една възможна интерпретация на проблема използвайки за база поведението на разтеглената експоненциална функция на Kohlrausch.

7. Глава 3.7 разглежда няколко примера, публикувани в литературата, където експоненциалната релаксационна функция е получена експериментално или в резултат на развитие на модел, даващи възможност за използване на интегралния оператор (производна) на Caputo-Fabrizio.

ГЛАВА 3.1

ДРОБНИ ОПЕРАТОРИ (ПРОИЗВОДНИ) С

НЕСИНГУЛЯРНИ ЯДРА*

Състояние на проблема

Тази глава представя един опит за обобщение на съществуващата информация относно дробните оператори с несингулярни ядра предложени от Caputo и Fabrizio през 2015 г. Тази идея привлече вниманието на изследователите и текста обхваща последователно развитието на идеята и появата на нови дробни оператори (производни) както от тип Riemann–Liouville така и производни на Atangana-Baleanu с ядра представени чрез функцията на Mittag-Leffler.

1. ВЪВЕДЕНИЕ

Тази глава насочва вниманието към развитието на едно ново направление в дробното смятане, използващо дробни оператори с експоненциални несингулярни ядра, предложени през 2015 от Caputo и Fabrizio [1]. Това е нова област в моделирането на дисипативни процеси чрез дробни оператори с несингулярни ядра, за разлика от широко използваните дробни производни със слаби сингулярни ядра (non-singular kernels) от тип Riemann-Liouville или Caputo [2]. Ние ще прескочим анализа на класическите производни и дисипативните процеси моделирани чрез тях (виж Глава А2 и Глава А3) и ще концентрираме вниманието върху новото направление възникнало след работата на Caputo и Fabrizio [1].

Публикувано като: **Част 1 и 2 на Hristov J. DERIVATIVE WITH NON-SINGULAR KERNELS: From the Caputo-Fabrizio definition and beyond: Appraising analysis with emphasis on diffusion models, Chapter 10, in *Frontiers in Fractional Calculus*, 2017, vol.1, S. Bhalekar, Ed., Bentham, Publ. 2017, pp.270-342.**

Новата дефиниция на *дробна производна*, наричана тук **интегрален оператор**, привлече веднага вниманието на изследователите и твърде много статии с нейното използване бяха публикувани за последните 2 години. Целта на тази глава е да представи накратко свойствата на тези производни, както и някои нови резултати провокирани от дефиницията предложена в [1].

Въпросите свързани с дифузионни модели показващи възникването на интегралния оператор (производна) на Caputo-Fabrizio са изложени в следващите три глави.

2. ДРОБНИ ОПЕРАТОРИ (ПРОИЗВОДНИ) С НЕСИНГУЛЯРНИ ЯДРА

2.1. Дробна производна с несингулярно ядро от тип Caputo

2.1.1. Основна дефиниция на производната по време на Caputo-Fabrizio

Възникването на новата дефиниция за дробна производна с експоненциално ядро е отговор на много въпроси възникващи от формулировката на класически конститутивни уравнения за пренос на момент, маса и енергия (виж примерите в последната глава на тази част), които не могат да се моделират адекватно, когато имаме нови материали и модерни технологии за тяхното получаване.

Отговорът на Caputo и Fabrizio на тези въпроси, при моделирането на релаксационни процеси на дисипативни явления, е следната **конститутивна дефиниция** [1]

$${}_c D_t^\alpha f(t) = \frac{M(\alpha)}{1-\alpha} \int_0^t \exp\left[-\frac{\alpha(t-s)}{1-\alpha}\right] \frac{df(s)}{ds} ds \quad (1)$$

В уравнение (1) $M(\alpha)$ е нормализираща функция изпълняваща условието $M(0) = M(1) = 1$.

Това е дефиниция от тип Caputo, защото под знака на интеграла имаме производната $df(t)/dt$. В някои случаи, по-нататък, ние ще използваме символа ${}_c^R D_t^\alpha f(t)$ за дефиницията (1) за да я различаваме от производната тип Riemann-Liouville, също използваща експоненциално ядро и означавана като ${}_c^R D_t^\alpha f(t)$

Следвайки обясненията на Caputo и Fabrizio [1] дефиницията (1) може

$${}_c D_t^\alpha = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_a^t \frac{df(s)}{ds} \frac{1}{(t-s)^\alpha} ds \quad (2)$$

със $\alpha \in [0,1]$ и $a \in [-\infty, t)$, където $f(t) \in H^1(a,b)$ за $b > a$.

Замествайки ядрото $(t-s)^\alpha$ с експоненциалната функция $\exp\left(-\frac{\alpha}{1-\alpha}t\right)$ и

$\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)}$ с $\frac{M(\alpha)}{1-\alpha}$ ние получаваме дефиницията

(1). Това е формално обяснение без физическа обосновка. Независимо от това, в следващите три глави на тази част (глави 3.2, 3.3 и 3.4) ще бъде показано, че дефиницията (1) следва естествено от конститутивни уравнения свързващи потока и градиента чрез експоненциална демпфираща (ядро) функция. Преди обаче, да се концентрираме върху физиката и свързаните с нея

конститутивни уравнения водещи до дефиницията (1).

Свойствата на този интегрален оператор са разгледани в

DERIVATIVE WITH NON-SINGULAR KERNELS: From the Caputo-Fabrizio definition and beyond: Appraising analysis with emphasis on diffusion models, Chapter 10, in *Frontiers in Fractional Calculus*, 2017, vol.1, S. Bhalekar, Ed., Bentham, Publ. 2017, pp.270-342.

Поради ограничеността на формата на автореферата, този проблем не разгледан тук

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Caputo, M.C., Fabrizio, M., A new definition of fractional derivative without singular kernel, *Progr. Fract. Differ. Appl.*, vol.1, no.1 pp.73--85, 2015.
- [2] Podlubny, I., *Fractional Differential Equations*, Academic Press, New York, 1999.
- [3] Caputo, M.C., Fabrizio, M., Applications of new time and spatial fractional derivatives with exponential kernels, *Progr. Fract. Differ. Appl.*, vol.2, no.1, pp.1--11, 2016.

ГЛАВА 3.2

НЕСТАЦИОНАРНА ДИФУЗИЯ С НЕСИНГУЛЯРНА ИЗЧЕЗВАЩА ПАМЕТ¹

От уравнение на Катанео с ядро на Джефри до дробен (по време) оператор на Капуто-Фабрицио

Представено и извеждането на уравнението за нестационарна топлопроводност, като от конститутивното уравнение на Катанео за релаксация на топлинния поток с експоненциално ядро да Джефри се дефинира дробната производна на Капуто-Фабрицио. Този подход позволява да се види физичната основа на която се основа тази нова производна и дава и демонстрира как други конститутивни уравнения могат да бъдат модифицирани с не-сингулярна релаксационни ядра

1. ВЪВЕДЕНИЕ

Тази глава разглежда сравнително нов проблем в областта на моделиране на дисипативни явления. В основополагащата статия на Caputo and Fabrizio [1], е дефиниран нов оператор с несингулярно ядро, а именно

$$\begin{aligned} {}_{CF}D_t^\alpha f(t) &= \frac{M(\alpha)}{1-\alpha} \int_0^t \exp\left[-\frac{\alpha(t-s)}{1-\alpha}\right] \frac{df(s)}{ds} ds = \\ &= \frac{1}{1-\alpha} \int_0^t \exp\left[-\frac{\alpha(t-s)}{1-\alpha}\right] \frac{df(s)}{ds} ds \end{aligned} \quad (1a,b)$$

В уравнение (1a), $M(\alpha)$ е нормализираща функция изпълняваща условието $M(0) = M(1) = 1$. Съгласно дефиницията на тази нова производна, ако $f(t) = C = const.$, то тогава

${}_{CF}D_t^\alpha f(t) = 0$ както и при класическата производна на Caputo [2], но сега ядрото няма особености (не е сингулярно). Losada and Nieto [4], показват, че в един специален случай, нормализиращата функция може да бъде $M(\alpha) = 2/(2-\alpha)$. Трябва да се отбележи, че в оригиналната статия на Caputo and Fabrizio се допуска, за удобство, че $M(\alpha) = 1$, което автоматично води до крайната дефиниция на тази нова производна (по време) [1,3,4] във формата представена от у-ние (1b).

Операторът на Caputo-Fabrizio веднага слез появата си привлече вниманието на изследователите и за около 1 година (от Април 2015 до публикуване на статията лежаща в основата на тази глава) след публикуване на основополагащата статия [1] бяха публикувани множество публикации с разнообразни приложения: проблеми на еластичността [3], съпротивление и поведение на дробни електрически вериги (fractional electric circuit) [5, 6], нелинейният модел на Keller-Segel [7], уравнението на Fisher [8], свързани системи от дробни диференциални уравнения [9], системи с пружинно демпфериране [10], течения в порести среди [11], и др..

Независимо от възникналият интерес към тази нова производна, в литературата отсъства ясно формулировка за връзката и със съответната физична постановка. По точно, в основополагащата статия на Caputo и Fabrizio [1] директно се постулира интегралния оператор (1a,b) и се обсъждат някои негови свойства. Поради тази причина, основното цел на тази глава

¹ Публикувано като: [Transient Heat Diffusion with a Non-Singular Fading Memory: From the Cattaneo Constitutive Equation with Jeffrey's kernel to the Caputo-Fabrizio time-fractional derivative, *Thermal Science*, 20 \(2\) \(2016\), pp. 765-770.; DOI:10.2298/TSCI160112019H](#)

е да представи изследване, където тръгвайки от основното конститутивно уравнение на Cattaneo за релаксация на топлинния поток чрез интеграл с временна памет е възможно, в линейно приближение и модифицирана релаксационна функция, да се получи по естествен път формулировката на интегралния оператор (1a,b).

2. УРАВНЕНИЕ НА КАТАНЕО С ЯДРО НА ДЖЕФРИ

Дифузията на топлина и маса се представя чрез консервативно (закон за запазване на енергия или маса) уравнение

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{\partial q}{\partial x},$$

$$q(x,t) = -k \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} \Rightarrow \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (2a,b,c)$$

Основното допускане (2b) е, че потокът $q(x,t)$ е пропорционален на градиента, което автоматично води до дефиницията на коефициента на топлопроводност k . От уравнения (2a) и (2b) се стига до вторият закон на Фурие (Фик) представен чрез (2c). Основният недостатък на това уравнение е, че то дефинира нереална безкрайна скорост на разпространение на топлинния поток.

Cattaneo [12] дефинира релаксираща функция свързана с крайната скорост на разпространение на топлинния поток, чрез обобщено представяне на уравнението на Фурие, като се използва линейна суперпозиция на топлинния поток и неговата производна по време по отношение на историята му (*generalization of the Fourier law through a linear superposition of the heat flux and its time derivative related to its history*)

[13,14]. Използвайки тази концепция, топлинният поток q е свързан с конститутивно уравнение [12] свързващо градиента с неговата история чрез време за закъснение s .

$$q(x,t) = - \int_{-\infty}^t R(x,t) \nabla T(x,t-s) ds \quad (3)$$

За хомогенен и твърд материал, провеждащ топлина, функцията $R(x,t)$ не зависи от пространствената координата и може да бъде представена чрез ядрото на Джефри [1,16] като $R(t) = \exp(-(t-s)/\tau)$, където релаксационното време τ е крайно. В този случай енергийният баланс води до уравнението на Катанео [12]

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = -\frac{a_2}{\tau} \int_0^t \exp\left[-\left(\frac{t-s}{\tau}\right)\right] \frac{\partial T(x,s)}{\partial x} ds$$

$$a_2 = \frac{k_2}{\rho C_p} \quad (4)$$

За $\tau \rightarrow 0$ уравнението на Катанео преминава в уравнението на Фурие. Следователно, при апроксимация от първи порядък, по отношение на τ , модифицираното уравнение на Фурие е [17]

$$q(x,t+\tau) \approx q(x,t) + \tau \frac{\partial q(x,t)}{\partial x} \quad (5)$$

Този подход води до диференциалното уравнение [17]

$$\frac{1}{\tau} q(x,t) + \frac{\partial q(x,t)}{\partial t} = -\frac{k_1}{\tau} \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} \quad (6)$$

Интегрирането на (6) води до (3), което е най-простата функционална зависимост отразяваща факта, че потока има крайна скорост на разпространение. Joseph and Preziosi [16] разглеждат една модифицирана релаксационна

функция $R_{jp} = k_1 \delta(s) + (k_2/\tau) \exp(-s/\tau)$, където $\delta(s)$ е делта функция на Dirac, а k_1 и k_2 са съответно ефективният коефициент на топлопроводност и еластичният коефициент на топлопроводност. В този случай уравнението на Фурие води до следната дефиниция на топлинния поток [16,17]

$$q(x,t) = -k_1 \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} - \frac{k_2}{\tau} \int_{-\infty}^t e^{-\frac{(t-s)}{\tau}} \frac{\partial T(x,s)}{\partial x} ds \quad (7)$$

Резултатът, следващ от (2а) [15] води до интегро-диференциално уравнение (Jeffrey's type integro-differential equation) [17]

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = a_1 \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} + \frac{a_2}{\tau} \int_{-\infty}^t e^{-\frac{(t-s)}{\tau}} \frac{\partial^2 T(x,s)}{\partial x^2} ds, \quad a_1 = k_1/\rho C_p, \quad a_2 = k_2/\rho C_p \quad (8)$$

3. КЪМ ДРОБЕН ОПЕРАТОР С ЕКСПОНЕНЦИАЛНО ЯДРО

Нека разгледаме незагрят подложен на топлинно натоварване на границата $x=0$, т.е. при следните гранични и начални условия

$$T(x,0) = T(0,0) = T(\infty,t) = T_x(x,0) = T_{xx}(x,0) = 0, \quad T(0,t) = T_s \quad (9)$$

С означението $F(x,t) = \partial^2 T(x,t)/\partial x^2$ и интегриране по части на последният член на уравнение (8), резултатът е

$$\beta \int_{-\infty}^t e^{-\beta(t-s)} F(x,s) ds = e^{-\beta(t-s)} [F(x,s) - F(x,t)] \Big|_{-\infty}^t + \beta \int_{-\infty}^t e^{-\beta(t-s)} [F(x,t) - F(x,s)] ds \quad (10)$$

Първият член в дясната страна на (10) е нула, докато вторият съвпада с конструкцията на оператора на Caputo-Fabrizio [3], а именно

$${}_{CF}D_t^\alpha = \frac{\alpha}{(1-\alpha)^2} \int_{-\infty}^t [f(t) - f_a(s)] \exp\left[-\frac{\alpha}{1-\alpha}(t-s)\right] ds, \quad t > 0 \quad (11)$$

Конструкцията (11) е *pro-Caputo derivative* (не нормализирана) ${}_{PC}D_t^\beta$. Скоростната константа β в (12а,b) контролира ядрото и $\beta \in (0, \infty)$ и използвайки един единствен параметър $0 < \alpha < 1$, използваме функционалната връзка $\beta(\alpha) = \alpha/(1-\alpha)$ [1,2]

С нормализираща функция $M(\alpha) = 1$, както беше отбелязано в началото, формата на (11) се редуцира до оператора на Caputo-Fabrizio от $F(x,t)$, дефинирана от у-ние (1b).

Сега, нека се върнем към уравнение eq.(8), представено чрез $T(x,t)$, като отчетем получените резултати (11) и връзката $\beta(\alpha)$. Тогава, последният член на (8) е операторът на Caputo-Fabrizio относно $\partial^2 T(x,t)/\partial x^2$, а именно

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = a_1 \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} + a_2 (1-\alpha) {}_{CF}D_t^\alpha \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2}, \quad t > 0 \quad (12)$$

Уравнение (12) моделира нестационарна топлопроводност чрез интегрален оператор на Caputo-Fabrizio. Ясно се вижда, че при $\alpha=1$ получаваме уравнението на Фурие. Намаляващата стойност на α , което физически означава нарастване на демпфиращия (релаксационен)

ефект на средата, води до нарастване на тежестта на този член в уравнението.

ИЗВОДИ

Конститутивното уравнение Cattaneo с ядро на Jeffrey в интеграла води по естествен път до уравнение за топлопроводност с релаксационен член представен чрез оператора на Caputo-Fabrizio.

Интегро-диференциалното уравнение (16a,b) изразено чрез оператора на Caputo-Fabrizio е наречена в [21] модел на Cattaneo-Hristov за еластична топлопроводност. Пълната форма на уравнението на Cattaneo-Hristov е уравнение (12).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Caputo, M., Fabrizio, M., A new definition of fractional derivative without singular kernel, *Progr. Fract. Differ. Appl.*, 1 (2015), 2, pp. 73-85.
- [2] Podlubny, I, *Fractional Differential Equations*, Academic Press, New York, 1999.
- [3] Caputo, M., Fabrizio, M., Applications of new time and spatial fractional derivatives with exponential kernels, *Progr. Fract. Differ. Appl.*, 2 (2016), 2, pp. 1-11.
- [4] Losada, J., Nieto, J. J., Properties of a New Fractional Derivative without Singular Kernel, *Progr. Fract. Differ. Appl.*, 1 (2015), 2, pp. 87-92.
- [5] Atangana, A.; Badr, S.T.A. Extension of the RLC electrical circuit to fractional derivative without singular kernel. *Adv. Mech. Eng.* **2015**, 7, pp1-6.
- [6] Atangana, A., Nieto, J.J., Numerical solution for the model of RLC circuit via the fractional derivative without singular kernel, *Advances in Mechanical Engineering*, 7 (2015),10, pp.1-7, doi: 10.1177/1687814015613758.
- [7] Atangana, A., Badr, S.T.A. Analysis of the Keller-Segel model with a fractional derivative without singular kernel, *Entropy*, 17(2015),,pp. 4439-4453; doi:10.3390/e17064439
- [8] Atangana, A, On the new fractional derivative and application to nonlinear Fisher's reaction-diffusion equation, *App. Math. Comp.*, 273 (2016), pp. 948-956;
- [9] Alsaedi, A., Baleanu, D., Sina Etemad, S., Shahram Rezapour, S. On Coupled Systems of Time-Fractional Differential Problems by Using a New Fractional Derivative, *J. Function Spaces*, v. 2016, Article ID 4626940, doi: 10.1155/2016/4626940.
- [10] Gómez-Aguilar, J.F., Yépez-Martínez, H., Calderón-Ramón, C., Cruz-Orduña, I. Fabricio Escobar-Jiménez, R., Hugo Olivares-Peregrino, V., Modeling of a Mass-Spring-Damper System by Fractional Derivatives with and without a Singular Kernel, *Entropy*, 17 (2005), pp. 6289-6303;
- [11] Atangana, A., Badr, S.T.A., New model of groundwater flowing within a confine aquifer: application of Caputo-Fabrizio derivative, *Arabian Journal of Geosciences*, January 2016, 9:8, doi: 10.1007/s12517-015-2060-8
- [12] Cattaneo, C, On the conduction of heat (In Italian), *Atti Sem. Mat. Fis. Università Modena*, 3 (1948),1, pp. 83-101.
- [13] Carillo, S., Some Remarks on Materials with Memory: Heat Conduction and Viscoelasticity, *J. Nonlinear Math. Phys.*, 12 (2005), Suppl. 1, pp. 163-178.
- [14] Ferreira, J.A., de Oliveira, P., Qualitative analysis of a delayed non-Fickian model, *Applicable Analysis*, 87(2008), 8, pp. 873-886.
- [15] Curtin, M. E, Pipkin, A.C., A general theory of heat conduction with finite wave speeds, *Archives of Rational Mathematical Analysis*, 31 (1968), 2, pp. 313-332.
- [16] Joseph, D.D., Preziosi, Heat waves, *Rev.Mod. Phys.*, 61 (1989), 1, pp. 41-73
- [17] Araujo, A., Ferreira, J.A., Oliveira, P., The effect of memory terms in diffusion phenomena, *J. Comp. Math.*, 24 (2000), 1, 91-102.
- [18] Hristov, J. A Note on the Integral Approach to Non-Linear Heat Conduction with Jeffrey's Fading Memory, *Thermal Science*, 17 (2013),3,pp. 733-737
- [19] Hristov, J., The heat-balance integral method by a parabolic profile with unspecified exponent: Analysis and benchmark exercises, *Thermal Science*, 13 (2009), 2, pp.22-48.
- [20] Hristov J., Double Integral-Balance Method to the Fractional Subdiffusion Equation: Approximate solutions, optimization problems to be resolved and numerical simulations, , *J. Vibration and Control (SAGE)*, 23 (2017),7,pp. 2795-2818; DOI: 10.1177/1077546315622773 ;
- [21] Koca, I. A. Atangana, Solutions of Cattaneo-Hristov model of elastic heat diffusion with Caputo-Fabrizio and Atangana-Baleanu fractional derivatives, *Thermal Science* 21 (2017), 6, pp. 2299-2305.,

ГЛАВА 3.3

СТАЦИОНАРНА ТОПЛОПРОВОДНОСТ В

СРЕДА С ПРОСТРАНСТВЕНА¹

НЕСИНГУЛЯРНА ИЗЧЕЗВАЩА ПАМЕТ:

Пространствен оператор (производна) а на

Caputo-Fabrizio с ядро на Jeffrey

и аналитични решения

Развита е изходната форма на конститутивното уравнение на Cattaneo с ядро на Jeffrey с цел разглеждане на нестационарна топлопроводност на в термини на дробната производна на Caputo-Fabrizio. Този подход позволява да се види физическата основа на една нова дефиниция на пространствена производна на Caputo-Fabrizio и да се демонстрира как други конститутивни уравнения могат да бъдат трансформирани в такива с не-сингулярни изчезващи памети.

1. ВЪВЕДЕНИЕ

Тази глава разглежда един съвременен проблем свързан с моделирането на дисипативни процеси [1, 2, 3] чрез използване на пространствени дробни оператори. Както е отбелязано от Caputo и Fabrizio [1,3] много класически конститутивни уравнения не могат да моделират преносните процеси в много нови материали със специфични характеристики (the transport properties of new materials with advanced characteristics). За да се реши този проблем нов оператор с не-сингулярно ядро беше предложена от Caputo и Fabrizio [1]

¹ Публикувано като: [Hristov J., Steady-State Heat Conduction in A Medium With Spatial Non-Singular Fading Memory: Derivation of Caputo-Fabrizio space-fractional derivative with Jeffrey's kernel and analytical solutionsp *Thermal Science*, 2017, vol. 21, No. 2, pp. 827-839; DOI:10.2298/TSCI160229115H](#)

$${}_{CF}D_t^\alpha f(t) = \frac{M(\alpha)}{1-\alpha} \int_0^t \exp\left[-\frac{\alpha(t-s)}{1-\alpha}\right] \frac{df(s)}{ds} ds =$$

$$= \frac{1}{1-\alpha} \int_0^t \exp\left[-\frac{\alpha(t-s)}{1-\alpha}\right] \frac{df(s)}{ds} ds$$

(1a,b)

където в дефиницията(1a) $M(\alpha)$. Виж за повече подробности Глава 3.1 и Глава 3.2.

Операторът (производната) по време на Caputo-Fabrizio (1) е използвана при моделирането на редица практически важни проблеми [3,4,5,6,7,8,9,10,11].

В предишното съобщение [12] (Глава 3.2) беше показано, че стартирайки от основното конститутивно уравнение с експоненциално ядро на Jeffrey, може да се изведе модел на едномерна нестационарна топлопроводност в еднородна среда в термини на дробен (по време) оператор на Caputo-Fabrizio (1), а именно

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = a_1 \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} + a_2 (1-\alpha) {}_{CF}D_t^\alpha \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2},$$

$$t > 0 \quad (2)$$

Сега, ние обръщаме вниманието върху граничното състояние на стационарна топлопроводност в среда с пространствена памет и модел изразен чрез оператор на Caputo-Fabrizio.

2. ОТ УРАВНЕНИЕТО НА КАТАНЕО КЪМ ЕФЕКТИ С ПАМЕТ ПО ПРОСТРАНСТВО И ВРЕМЕ

Започвайки от уравнението за съхранение на енергията, основният модел за нестационарна топлопроводност (едномерен модел) е

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{\partial q}{\partial x}, \quad (3a)$$

$$q(x,t) = -k \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} \Rightarrow \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (3b,c)$$

Основното уравнение (3b) представя потока $q(x,t)$ като пропорционален на температурния градиент, което по същество е дефиниране на коефициента на топлопроводност k . Следователно, уравнението на Фурие (2c) следва логично, но то дефинира нефизична безкрайна скорост на разпространение на топлинния поток.

Уравнението на Cattaneo [13] е генерализация на закона на Фурие чрез линейна суперпозиция на топлинния поток и неговата производна по време свързана чрез неговата история (memory integral) [14,15] и закъснение по време s .

$$q(x,t) = -\int_{-\infty}^t R(x,t) \nabla T(x,t-s) ds \quad (4a)$$

Нека сега представим потока във формата (4) чрез памети (закъснения по време и пространство)

$$q(x+\lambda, t+\tau) = -k_1 \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} \quad (4b)$$

Дистанцията отразяваща ефекта на паметта (the memory distance) λ е крайна величина (т.е. $\lambda = \text{const.}$) и тя е мащаб за дължина (length scale) по отношение на пространствените ефекти върху топлинния поток и неговата корелация с температурния градиент. Апроксимацията от първи порядък по отношение на τ и λ , лесно може да се развие чрез конвенционален ред на Тейлор, което в крайна сметка води до модифицирано уравнение на Фурие, а именно

$$q(x+\lambda, t+\tau) \approx q(x,t) + \tau \frac{\partial q(x,t)}{\partial t} + \lambda \frac{\partial q(x,t)}{\partial x} \quad (5)$$

2.1. Само временна памет: водещ пример (Temporal memory only: the guiding example)

Ако $R(x,t)$ е независима от пространствената координата (space-independent) и се представя чрез ядрото на Jeffrey [1,16] като $R(t) = \exp(-(t-s)/\tau)$, то тогава балансът на енергия води до уравнението на Cattaneo [13]

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = -\frac{a_2}{\tau} \int_0^t \exp\left[-\left(\frac{t-s}{\tau}\right)\right] \frac{\partial T(x,s)}{\partial x} ds$$

$$, a_2 = \frac{k_2}{\rho C_p} \quad (6)$$

Апроксимацията от първи порядък (виж у-ние.5), по отношение на τ и прилагайки модифицираната релаксационна функция [16, 17]

$$R_{JP} = k_1 \delta_t(s) + (k_2/\tau) \exp(-s/\tau), \quad \int_0^{0+} \delta_t(s) ds = 1 \quad (7)$$

, където $\delta_t(s)$ е функцията на Dirac, потокът се дефинира като [16,17]

$$q(x,t) = -k_1 \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} - \frac{k_2}{\tau} \int_{-\infty}^t e^{-\frac{(t-s)}{\tau}} \frac{\partial T(x,s)}{\partial x} ds \quad (8)$$

Уравнение (8) дефинира ефективната топлопроводност (effective thermal conductivity) k_1 и еластичната топлопроводност (elastic conductivity) k_2 . В този случай уравнението за съхранение на енергията [18] води до интегро-диференциално уравнение на Jeffrey [17] и

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = a_1 \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} + a_2 \beta \int_{-\infty}^t e^{-\beta(t-s)} \frac{\partial^2 T(x,s)}{\partial x^2} ds,$$

$$a_1 = k_1/\rho C_p, \quad a_2 = k_2/\rho C_p, \quad \beta = 1/\tau \quad (9)$$

Интегрирането по части на последният член в уравнение (9) (виж [12] (Глава 3.2) за детайли) води до уравнение (2).

2.2. Пространствена памет: анализ по аналогия

Сега, в случай на стационарна топлопроводност в среда с пространствена памет, ние можем да дефинираме по аналогия, че топлинния поток е свързан чрез температурния градиент със функционална връзка (10a)

$$q(x) = - \int_{-\infty}^x R(x) \nabla T(x-u) du ,$$

$$q(x) = - \int_{-\infty}^x e^{-\left(\frac{x-u}{\lambda}\right)} \frac{dT(u)}{dx} du \quad (10a,b)$$

Ако ядрото се дефинира като $R(x) = \exp(-(x-u)/\lambda)$, то ние получаваме (10b).

Както беше отбелязано по рано, λ е характеристична дължина на пространствената памет (the *spatial memory length scale*) докато реципрочната и стойност $\gamma = 1/\lambda$ е *константа на пространствена памет* (space memory constant $\gamma = 1/\lambda$). Апроксимацията от първи порядък на топлинния поток по отношение на λ е

$$q(x+\lambda) = -k_1 \frac{dT(x)}{dx} , \quad q(x+\lambda) \approx q(x) + \lambda \frac{dq(x)}{dx} \quad (11a,b)$$

Повтаряйки, по аналогия, концепцията за модифицирана пространствено свързана функция на памет (a *modified space-related memory function*) [17] ние можем да дефинираме

$$R^*(x) = k_1 \delta_x(u) + (k_{2x}/\lambda) \exp(-u/\lambda), \quad \int_0^{\infty} \delta_x(u) du = 1 \quad (12a)$$

Тогава, топлинният поток се дефинира като

$$q(x) = -k_1 \frac{dT(x)}{dx} - \frac{k_{2x}}{\lambda} \int_{-\infty}^x e^{-\left(\frac{x-u}{\lambda}\right)} \frac{dT(u)}{dx} du \quad (12b)$$

Уравнение (12b) дефинира *ефективната топлопроводност* (effective thermal conductivity)

k_1 , която е същата като тази дефинирана в у-ние.(8). Коефициентът на топлопроводност k_{2x} може да се дефинира като *структурна еластична топлопроводност* (structural elastic conductivity) свързана с пространствените ефекти на памет.

Ако ефектът на пространствена памет отсъства,

$$\text{то тогава } q(x) = -(k_1 + k_{2x}) \frac{dT(x)}{dx} \text{ и } k = k_1 + k_{2x}.$$

Сега, ние можем да го представим (12b) като

$$\frac{d}{dx} q(x) = -k_1 \frac{d^2 T(x)}{dx^2} - \frac{k_{2x}}{\lambda} \int_{-\infty}^x e^{-\left(\frac{x-u}{\lambda}\right)} \frac{d^2 T(u)}{dx^2} du \quad (13)$$

Прилагайки основната зависимост (3a) ние получаваме интегро-диференциално уравнение на Jeffrey, но отношение на пространствената координата

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a_1 \frac{d^2 T(x)}{dx^2} + a_{2x} \gamma \int_{-\infty}^x e^{-\gamma(x-u)} \frac{d^2 T(u)}{dx^2} du$$

$$a_1 = k_1 / \rho C_p, \quad a_{2x} = k_{2x} / \rho C_p, \quad \gamma = 1/\lambda \quad (14)$$

Интегрирането по части на последният член на у-ние (14) и следвайки модела на извеждане развит в Глава 3.2 води до *pro-Caputo* (не-нормализирана) пространствена производна (оператор) (*space-derivative*) ${}_{PC} D_x^\gamma$

$${}_{PC} D_x^\gamma F(x) = \gamma \int_{-\infty}^x e^{-\gamma(x-s)} \frac{dF(u)}{dx} du \quad (15)$$

Очевидно е, че константата на пространствена памет $\gamma \in (0, \infty)$ и ако искаме да рафинираме ${}_{PC} D_x^\gamma$ като интегрален оператор да бъде контролиран само от един параметър $0 < \mu < 1$, то тогава трябва да са изпълнени

условията: за $\mu \in [0,1] \Rightarrow 1/\gamma \in [0,\infty]$. С $\gamma(\mu) = \mu/(1-\mu)$ [1,2] необходимите условия се постигат. По-нататък, следвайки основната дефиниция на производната на Caputo-Fabrizio [1, 2] (виж у-ние (1)) и приемайки долната граница на интеграла в уравнение (15) при $x=0$, ние получаваме

$${}_{CF}D_x^\mu T(x) = \frac{M(\mu)}{1-\mu} \int_0^x e^{\frac{-\mu}{1-\mu}(x-u)} \frac{dT(u)}{du} du \quad (16)$$

Проблемът с дефинирането на $M(\mu)$ стои отворен [1,4] и в съгласие с основната дефиниция ние приемаме $M(0) = M(1) = 1$. Следвайки Losada и Nieto [4], нормализиращата функция е $M(\mu) = 2/(2-\mu)$, която в настоящия случай работи коректно за $\mu=0$, но при $\mu=0$ имаме $M(1) = 2$. Още повече, ако $M(\mu) = 1/(2-\mu)$, то тогава получаваме $M(0) = 1/2$ и $M(1) = 1$. Става ясно, че двете условия за $M(\mu)$ не могат да се изпълнят едновременно чрез разгледаните прости функционални зависимости $M(\mu)$. Тогава, с цел удобство, ние дефинираме $M(\mu) = 1$, така като е предложена от Caputo и Fabrizio в [1].

Следователно, при тези условия формата на у-ние (16) се редуцира до пространствен оператор (производна) на Caputo-Fabrizio по отношение на $T(x)$, която е дефинирана по аналогия с у-ние (1b). Лапласовата трансформация на (16) е представена чрез (17)

$$L[{}_{CF}D_x^\mu T(x)] = \frac{pT(p) - T(0)}{p + \mu(1-p)} \quad (17)$$

Важно е да се отбележи, че от дефиницията на експоненциалното ядро физическата размерност на γ е дължина [m], но от друга страна дробният порядък μ е безизмерен. Следователно, ние можем да представим λ като $\lambda = 1/\gamma = l_s [(1-\mu)/\mu]$, където размерността на коефициента l_s е дължина [m]. Без загуба на общност, при представянето ние можем да допуснем, че $l_s = 1$. По този начин, както ще бъде споменато по-нататък в тази глава, отношението $(1-\mu)/\mu$ има размерност на дължина, докато в същото време μ е безизмерна величина (виж разрешаването на тази конфликтна ситуация по-нататък в текста).

Сега, представяйки уравнение (14) чрез $T(x)$, ние получаваме пълното уравнение на топлопроводност с пространствен оператор на Caputo-Fabrizio, а именно

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a_1 \frac{d^2 T(x)}{dx^2} + a_{2x} (1-\mu) {}_{CF}D_x^\mu T(x) \\ a_1 = k_1/\rho C_p, \quad a_{2x} = k_{2x}/\rho C_p, \quad (18)$$

За условия на стационарност $t \rightarrow \infty$ имаме две еквивалентни представяния, а именно

$$0 = a_1 \frac{d^2 T(x,t)}{dx^2} + a_{2x} (1-\mu) {}_{CF}D_x^\mu \left(\frac{dT(x)}{dx} \right) \quad (19a)$$

$$0 = a_1 \frac{d^2 T(x,t)}{dx^2} + a_{2x} (1-\mu) \frac{d}{dx} ({}_{CF}D_x^\mu T(x)) \quad (19b)$$

3. УРАВНЕНИЯ С БЛИЗКО И ДАЛЕЧНО ВЪЗДЕЙСТВИЕ: Анализи и решения

Нека разгледаме материал с пространствена памет под формата на дълга лента с дължина L , с топлинно изолирана околна

повърхност. Материалът е подложен на топлинно натоварване при $x = 0$ и $x = L$, както следва

$$T(0) = T_0, \quad T(L) = T_L, \quad {}_{CF}D_x^\mu T_0 = {}_{CF}D_x^\mu T_L = 0, \quad T_0 > T_L.$$

Без загуба на общност, ние можем да приемем $T_L = 0$ (това е само линейно преместване температурната скала), което ще доведе до простота на изразите след това. Още повече, условието (19b) следва от дефиницията на оператора на Caputo-Fabrizio [1].

3.1. Ефекти на близка памет: Само пространствена памет

Ако се вземе в предвид само ядрото на Jeffrey като релаксационна функция, в този случай, ние можем да напишем, чрез пространствения оператор на Caputo-Fabrizio, следната зависимост за топлинния поток

$$q_2 = -k_{2x}(1-\mu) {}_{CF}D_x^\mu T(x) \quad (20)$$

Това уравнение е използвано от Yang et al. [19], независимо от факта, че операторът е от псевдо-Riemann-Liouville тип и не съвпада точно с ${}_{CF}D_x^\mu T(x)$ (виж повече детайли в [19]).

Физически, уравнение (20) означава, че макроскопското температурно поле се игнорира и се разглежда само зоналното разпределение на температурата (means that the macroscopic temperature field is ignored and the zonal temperature distribution is considered only). По-нататък, уравнение (28) отчита само *пространствено-структурната памет* върху дифузията на топлина и то важи само в зона дефинирана от $x_0 < x < x_0 + \lambda$, където $0 < x_0 < L$ и $0 < \lambda < L$. Пространствената памет свързана с коефициента на топлинна дифузия (*space-memory related thermal diffusivity*) a_{2x} отчита само ефекти

от близък порядък (*short-distance structural memory effects*). За $\mu = 1$ ние получаване нестационарната (21a) и стационарната (22b) версии, а именно

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = a_{2x} \frac{d^2 T(x)}{dx^2}, \quad 0 = a_{2x} \frac{d^2 T(x)}{dx^2}, \quad (21a,b)$$

Приемайки, че $T(x_0) > T(x_\lambda) > T(\lambda)$, където (21b) е представено в локалните координати на система с начало в $x = x_0$ и ос простира се до $x = x_\lambda = x_0 + \lambda$. Използвайки трансформация на Лаплас към (21) получаваме

$$\frac{T_{x_0} - T(x_\lambda)}{q_\lambda} = (1-\mu) + \mu x_\lambda \quad (22)$$

Линейният температурен профил (22) потвърждава решението на Yang et al. [19] *независимо от разликите при дефиниране на пространствената производна*. За $\mu = 1$ уравнение (21) уравнение (22) се редуцират до класическите решение на Фурие. Освен това, при $x_\lambda = x_0$ и $x_\lambda = x_0 + \lambda$ ние получаваме

$$T_{x_0} - T_\lambda = q_\lambda \mu \lambda \Rightarrow q_\lambda = (T_{x_0} - T_\lambda) / (\mu \lambda) \quad (23)$$

Зависимостта (23) е линейният закон на Фурие в рамките на зоната с памет с дължина λ . Замествайки q_λ в (23) с при $\lambda = (1-\mu)/\mu$ получаваме безизмерния температурен профил (в рамките на зоналната координатна система)

$$\frac{T_{x_0} - T(x)}{(T_{x_0} - T_\lambda)} = 1 + \frac{x_\lambda}{\lambda} = 1 + \frac{\mu}{1-\mu} x_\lambda \quad (24)$$

Преминаването към глобалната координатна система дефинирана като $0 < x < L$ е само просто транслиране $x_\lambda = x - \lambda$, което води до

$$\frac{T_{x_0} - T(x)}{(T_{x_0} - T_\lambda)} = \frac{x}{\lambda} = \frac{\mu}{1-\mu} z, \quad 0 < z_\lambda < 1 \quad (25)$$

Следователно, по дължина на зоната с памет ние имаме линеен температурен профил контролиран от параметъра на дробният порядък μ . Фигура 1a,b представя решенията (24) и (25) за различни стойности на μ .

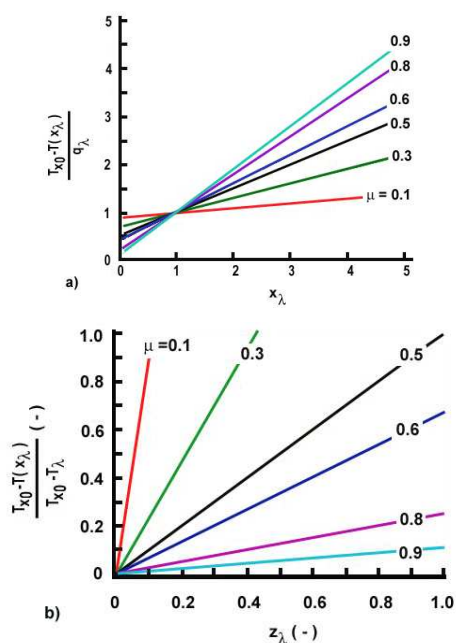


Fig. 1. Зонално температурно разпределение (само ефект на пространствена памет):
а) размерен профил ; б) безизмерен профил

3.2. Пространствена памет с разширена релаксационна функция

С пълната версия на релаксационната функция $R^*(x)$ получаваме две стационарни версии на на уравнението с пространствена памет

$$0 = (a_1 + a_{2x}) \frac{d^2 T(x)}{dx^2} + a_{2x} (1 - \mu) \frac{d}{dx} {}_{CF} D_x^\mu T(x) \quad (26)$$

$$0 = \frac{d^2 T(x)}{dx^2} + m(1 - \mu) \frac{d}{dx} {}_{CF} D_x^\mu T(x) \quad (27)$$

$$m = \frac{a_{2x}}{a_1 + a_{2x}} \quad (28)$$

За $\mu = 1$ получаваме коефициент на топлопроводност $k_0 = k_1 + k_{2x}$ (т.е. $a_0 = a_1 + a_{2x}$)

както и в случая на временна а памет [17].

Коефициентът на разпределение (*the partition coefficient*) $0 < m < 1$ отчита приноса на ефектите на пространствена памет (т.е. на коефициента a_{2x} отразяващ еластичната структурна топлинна дифузия) към пълният коефициент на топлинна дифузия a_0 . За $\mu = 1$ получаваме $m = 0$, т.е. няма ефект от пространствена памет.

3.2.1. Решение чрез трансформация на Лаплас

Интегрирането на уравнение (27) води до

$$C_3 = \frac{dT(x)}{dx} + m(1 - \mu) {}_{CF} D_x^\mu T(x) \quad (29)$$

Сега, обаче, ние прилагаме трансформацията на Лаплас към (29) и получаваме

$$T(x) = T_0 + C_3 \left[\frac{a}{b} x + \left(\frac{b-a}{b^2} \right) (1 - e^{-bx}) \right] \quad (30)$$

$$a = \mu / (1 - \mu), \quad b = m + a.$$

В този случай трябва да се определи константата C_3 . Ние продължаваме с уравнение (29) като интегрираме

$$C_3 x = T(x) + m(1 - \mu) \int [{}_{CF} D_x^\mu T(x)] dx + C_4 \quad (31)$$

От граничните условия следва, че

$$C_3 = (T_L - T_0) / L \quad \text{и} \quad C_4 = -T_0 \quad (31)$$

Следователно, в термини на температура, решението (31) може да се представи като

$$\begin{aligned}\theta_\mu &= \frac{T_0 - T(x)}{T_0 - T_L} = \\ &= \frac{a}{b} \frac{x}{L} + \frac{1}{L} \frac{a-b}{b^2} [1 - \exp(-bx)] + \left(\frac{b-a}{b^2} \right)\end{aligned}\quad (32)$$

Алтернативно, ако се приеме $T_L = 0$ се стига до резултата

$$\begin{aligned}\theta_{\mu(T_L=0)} &= \frac{T(x)}{T_0} = \\ &= 1 - \frac{a}{b} \frac{x}{L} - \frac{1}{L} \frac{a-b}{b^2} [1 - \exp(-bx)] + \left(\frac{b-a}{b^2} \right)\end{aligned}\quad (33)$$

Сега, обаче, отчитайки че $\gamma = 1/\lambda = \mu/(1-\mu)$ получаваме безизмерна форма на решението

$$\theta_\mu = \frac{\mu}{\mu + m(1-\mu)} z + \frac{\lambda}{L} \frac{m\mu(1-\mu)}{[\mu + m(1-\mu)]^2} [1 - e^{-(\gamma+m)x}] \quad (34)$$

Очевидно е, че приносът на нелинейния член на (34) зависи от отношението $\lambda/L < 1$.

3.2.2. Решение чрез директно интегриране и възникващи проблеми

Стартирайки от междинния резултат (31), чрез интегриране и трансформация на Лаплас, получаваме

$$\begin{aligned}\theta(z) &= \left(\frac{\gamma}{m+\gamma} \right) z - \\ &- \frac{1}{L} \left\{ \frac{1}{m+\gamma} \exp[-L(m+\gamma)z] + \frac{1}{m+\gamma} \right\}\end{aligned}\quad (35)$$

Уравнение (35) е аналог на решенията (32) и (33).

3.3. Отношението λ/L и параметъра на дробен порядък μ

Физически, L/λ е отношението на макроскопската характеристична дължина (*the macroscopic length scale* L) към пространствената

характеристична дължина на зоната с памет (*the spatial memory length scale* λ) и следователно е необходимо да се дефинира ясно неговата връзка с параметъра на дробен порядък μ .

Очевидно, че при $\lambda/L \leq 1$ ние сме задължени да свържем това отношение с стойностите на параметъра на дробен порядък μ защото по дефиниция ($\lambda = (1-\mu)/\mu$).

Използвайки означението $\lambda/L = K_L$ ние имаме три еквивалентни представяния на тази връзка, именно:

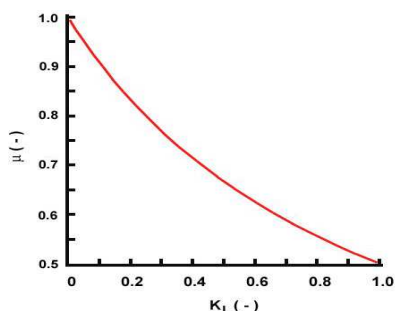
$$\begin{aligned}\frac{1-\mu}{\mu} \frac{1}{L} &= K_L, \quad \mu = \frac{1}{1+K_L}, \quad K_L = \frac{1-\mu}{\mu}, \quad L=1 \\ 0 &\leq K_L \leq 1,\end{aligned}\quad (36a,b,c)$$

Зависимостта $\mu = f(K_L)$ представена чрез връзката (51b) е показана на in Фиг.2. Отчитайки, че $0 \leq K_L = \lambda/L \leq 1$, то следва, че $0.5 \leq \mu \leq 1$. Долната граница $\mu = 0.5$ съответствува на $\lambda/L = 1$, когато цялата област е покрита с ефект на памет, докато при $\mu = 1$ имаме $\lambda = 0$ (отсъстват ефекти на пространствена памет).

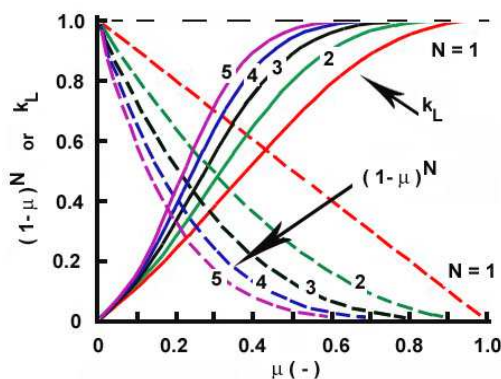
3.4. Коефициентът на разпределение m и параметъра на дробен порядък μ

В процеса на решението на задачата беше дефиниран коефициента на разпределение $m = a_{2x}/a_0$ и е естествено да зададем въпроса за връзка между m и параметъра на дробен порядък μ . От физична гледна точка, ние имаме, че когато $\mu \rightarrow 1$ то следва $m \rightarrow 0$, и обратно. Следователно, ако ние дефинираме връзката

$m = (1 - \mu)^N$, то тогава посочените гранични стойности ще бъдат изпълнени.



Фиг. 2. Зависимост на дробния порядък μ и отношението $K_L = \lambda/L$



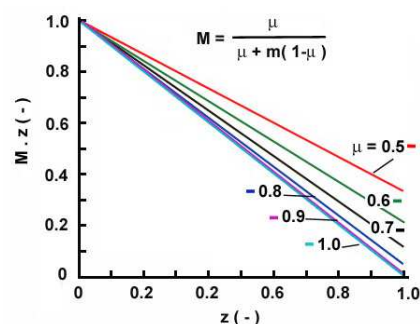
Фиг.3.Ефекти на дробния порядък μ и експонентата N върху функционалната връзка $m = f(\mu) = (1 - \mu)^N$ и коефициента K_m на първия член от уравнение (43)

От направения анализ на топлинните вълни [17], които в тази работа се използва като източник на идеи, следва, че бавният релаксационен ефект съответства на голяма стойност на k_2 и обратно. Заместването на m с $(1 - \mu)^N$ в получените решения прави μ единствения параметър контролиращ процеса. Тестове с различни стойности на експонентата N и коефициента на линейния член в решението, т.е. между $M = \mu / [\mu + m(1 - \mu)]$ и $m = (1 - \mu)^N$ са представени на Фиг.3. Тъй като условията $K_m = 1$

и $m = 0$ се изпълняват едновременно само при $N = 1$, то следващите числени експерименти са проведени при $N = 1$.

3.5. Температурни профили

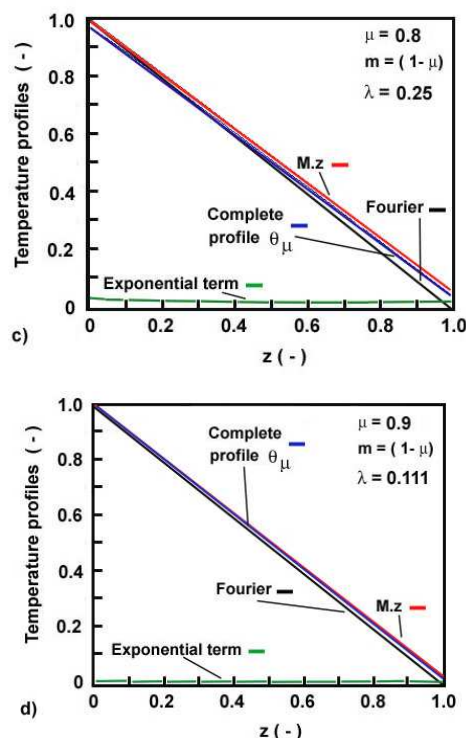
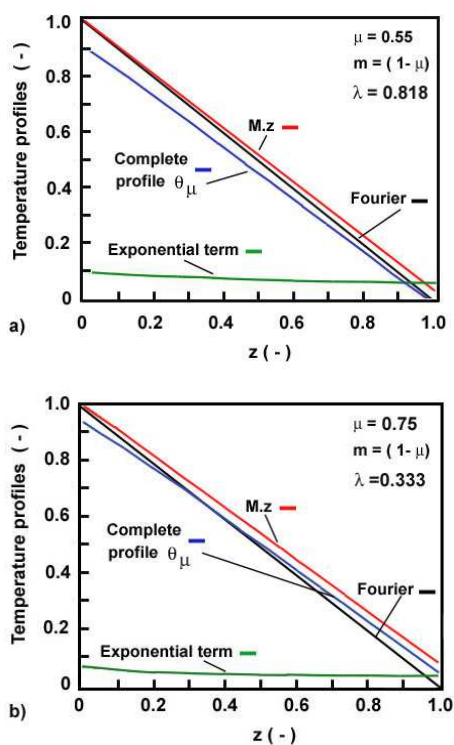
Температурните профили отчитащи ефектите на пространствена памет са показани на Фиг. 4 и Фиг. 5. Ние специално разделяме профилите съответстващи на двата члена на решението (43) за да се демонстрира как те се влияят от стойностите на дробния порядък μ (виж Фиг. 5). От показаните профили става ясно, че при ниски стойности на μ , когато $\mu \rightarrow 0.5$, зоната с ефект на памет покрива цялата разглеждана област и отношението λ/L се стреми към единица. Нарастването на стойността на μ редуцира ефекта на нелинейност в температурните разпределения, което ясно се демонстрира от температурните профили съответстващи на експоненциалния член на решението (виж долната част на фигури. 5a,b,c,d) и пълният член Mz (виж Фиг. 4). С нарастване на μ приносът на нелинейността намалява, по-специално тази предизвиквана от експоненциалния член, и пълният профил се стреми към линейното решение на Фурие.



Фиг. 4. Профили дефинирани от първия член на решението (43) в границите $0 \leq \mu \leq 1$ съответствуват на $0 \leq \lambda/L \leq 1$

ИЗВОДИ

Тази глава демонстрира как може да се дефинира пространствена дробна производна на Caputo-Fabrizio, в смисъл на подход аналогичен на класическото уравнение на Cattaneo, чрез формулиране на пространствено изчезваща памет, използваща експоненциално несингулярно ядро на Jeffrey. Получените решения фокусират вниманието върху стационарен проблем, както в



Фиг. 5. Температурни профили отчитащи ефекта на пространствена памет за различни стойности на дробния порядък μ

рамките на зона с пространствена памет (само пространствени ефекти на памет), така и макроскопска област с включване демонстриращо пространствена памет (a macroscopic zone with a memory zone inclusion). Показано е, че решението на Yang [19] е валидно само в зона с изразена пространствена памет и е свързано само с първия член на полученото пълно решение.

Дефиницията на пространствената дробна производна на Caputo-Fabrizio с експоненциално ядро, с дробен порядък μ , при отношение мащаба на дължина на зоната с ефект на памет λ към макроскопският мащаб за дължина L , т.е. в границите $1 \geq \lambda/L \geq 0$, съответствува на $0 \leq \mu \leq 1$.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Caputo, M., Fabrizio, M., A new definition of fractional derivative without singular kernel, *Progr. Fract. Differ. Appl.*, 1 (2015), 2, pp. 73-85.
- [2] Podlubny, I, *Fractional Differential Equations*, Academic Press, New York, 1999.
- [3] Caputo, M., Fabrizio, M., Applications of new time and spatial fractional derivatives with exponential kernels, *Progr. Fract. Differ. Appl.*, 2 (2016), 2, pp. 1-11.
- [4] Losada, J., Nieto, J. J., Properties of a New Fractional Derivative without Singular Kernel, *Progr. Fract. Differ. Appl.*, 1 (2015), 2, pp. 87-92.
- [5] Atangana, A.; Badr, S.T.A. Extension of the RLC electrical circuit to fractional derivative without singular kernel. *Adv. Mech. Eng.* **2015**, 7, pp1-6.
- [6] Atangana, A., Nieto, J.J., Numerical solution for the model of RLC circuit via the fractional derivative without singular kernel, *Advances in Mechanical Engineering*, 7 (2015), 10, pp.1-7.
- [7] Atangana, A., Badr, S.T.A. Analysis of the Keller-Segel model with a fractional derivative without singular kernel, *Entropy*, 17(2015), pp. 4439-4453;
- [8] Atangana, A, On the new fractional derivative and application to nonlinear Fisher's reaction-diffusion equation, *App. Math. Comp.*, 273 (2016), pp. 948-956; .
- [9] Alsaedi, A., Baleanu, D., Sina Etemad, S., Shahram Rezapour, S. On Coupled Systems of Time-Fractional Differential Problems by Using a New Fractional Derivative, *J. Function Spaces*, v. 2016, Article ID 4626940, doi: 10.1155/2016/4626940.
- [10] Gómez-Aguilar, J.F., Yépez-Martínez, H., Calderón-Ramón, C., Cruz-Orduña, I., Escobar-Jiménez, R., Hugo Olivares-Peregrino, V., Modeling of a Mass-Spring-Damper System by Fractional Derivatives with and without a Singular Kernel, *Entropy*, 17 (2005), pp. 6289-6303; doi:10.3390/e17096289
- [11] Atangana, A., Badr, S.T.A., New model of groundwater flowing within a confine aquifer: application of Caputo-Fabrizio derivative, *Arabian Journal of Geosciences*, January 2016, 9:8, doi: 10.1007/s12517-015-2060-8.
- [12] Hristov J., Transient Heat Diffusion with a Non-Singular Fading Memory: From the Cattaneo Constitutive Equation with Jeffrey's kernel to the Caputo-Fabrizio time-fractional derivative, *Thermal Science*, 20 (2016), 2, DOI:10.2298/TSCI160112019H
- [13] Cattaneo, C, On the conduction of heat (In Italian), *Atti Sem. Mat. Fis. Universit'a Modena*, 3 (1948), 1, pp. 83-101.
- [14] Carillo, S., Some Remarks on Materials with Memory: Heat Conduction and Viscoelasticity, *J. Nonlinear Math. Phys.*, 12 (2005), Suppl. 1, pp. 163-178.
- [15] Ferreira, J.A., de Oliveira, P., Qualitative analysis of a delayed non-Fickian model, *Applicable Analysis*, 87(2008), 8, pp. 873-886.
- [16] Araujo, A., Ferreira, J.A., Oliveira, P., The effect of memory terms in diffusion phenomena, *J. Comp. Math.*, 24 (2000), 1, 91-102.
- [17] Joseph, D.D., Preciozi, Heat waves, *Rev.Mod. Phys.*, 61 (1989), 1, pp. 41-73
- [18] Curtin, M. E, Pipkin, A.C., A general theory of heat conduction with finite wave speeds, *Archives of Rational Mathematical Analysis*, 31 (1968), 2, pp. 313-332.
- [19] Yang, X.J., Srivastava, H.M., Machado, J.A.T. A new fractional derivative without singular kernel: application to the modelling of the steady heat flow, *Thermal Science*, 20 (2016), 2, pp. 753-756; doi: 10.2298/TSCI151224222Y

ГЛАВА 3.4

ДРОБНО ДИФУЗИОННО УРАВНЕНИЕ НА

ДОДСЪН: Извод и анализ*

Дифузия с несингулярна изчезваща памет и експоненциално затихващ дифузионен коефициент

Използвайки конститутивното уравнение на Cattaneo с експоненциално ядро, приложено към уравнението за дифузия на маса, е получено ново уравнение с релаксационно ядро в термини на дробната по време производна на Caputo-Fabrizio. Новото уравнение се редуцира до уравнението на Додсън за случаи на големи релаксационни времена, съответстващи на малък дробен порядък на производната на Caputo-Fabrizio. Приложеният метод разделя ефектите за големи времена, водещи до класическото уравнение на Додсън с експоненциално затихващ дифузионен коефициент, от ефектите за малки времена, моделирани с дробната производна на Caputo-Fabrizio. Решението позволява да се види нова физическа основа на производната на Caputo-Fabrizio и да се демонстрира една нова интерпретация на нелинейното уравнение на Додсън чрез инкорпориране на ефект на затихваща памет. Освен това, предложен е нов модел с две затихващи памет. Дефинирайки параметрите на дифузионния процес е възможно директно да се определи дробния порядък на производната на Caputo-Fabrizio като функция на числото на Deborah, определено като отношение на релаксационното време и характеристичното дифузионно време на процеса.

1. ВЪВЕДЕНИЕ

1.1. Дифузионно уравнение на Додсън: физически предпоставки и оригинален извод

Дифузионното уравнение на Додсън (1) е предложено за описание на дифузия в минерали

[1,2], с цел анализ на историята на охлаждане на геологични системи, където дифузионният коефициент зависи от температурата, следвайки закона на Арениус (2), а именно

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = D_0(T) \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} \quad (1)$$

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (2)$$

Преди всичко, е важно да се отбележи, че дифузията в твърди тела е термично активиран процес [3,4]. Коефициентът D_0 представя дифузионния процес при екстремно високи температури. Съгласно Додсън [1], поради силната зависимост на дифузионния коефициент от температурата, то преходния температурен режим, където се разглежда дифузионния процес, може да се разглежда като сравнително къс по време. Освен това, Додсън използва факта, че за един ограничен интервал от температурната история на изстиващото твърдо тяло, тя може удобно да се апроксимира чрез линейна зависимост от инверсната температура $1/T$ [1,2,3,4,5,6]. Експоненциалното намаляване на дифузионния коефициент е условно представено чрез временна константа (релаксационно време) τ , която се дефинира като времето необходимо D да се редуцира с множител $1/e$, т.е. членът E/RT в уравнението на Арениус да се повиши с 1. При тези условия, следвайки Додсън [1]

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E}{RT_0} - \frac{t}{\tau}\right) = D(0) e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (3)$$

В уравнение (3) $D(0)$ и T_0 са стойности на дифузионния коефициент и температурата при

* Публикувано като: [Hristov J., Derivation of fractional Dodson's equation and beyond: Transient mass diffusion with a non-singular memory and exponentially fading-out diffusivity, *Progr. Fract. Differ. Appl.* \(2017\) vol.3, N04, 255-270; DOI: 10.18576/pfda/030402](#)

$t = 0$. От (3), което, всъщност, дефинира τ , получаваме, че

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{E}{RT} \right) = \frac{1}{\tau} \Rightarrow \tau = \frac{R}{\left(E \frac{dT^{-1}}{dt} \right)} = \frac{-RT^2}{E \frac{dT}{dt}} \quad (4)$$

Избягвайки дългите изводи на Додсън [1,2] и свързаните с проблема статии [3,4,5,6,7], моделът (1) се представя във вида

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = D(0) e^{-\frac{t}{\tau}} \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} \quad (5)$$

или в еквивалентна форма

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = D_0 e^{-\beta t} \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2}, \quad \beta = 1/\tau \quad (6)$$

12. Основни задачи на изследването

Тази глава разглежда като основен проблем извод на уравнението на Додсън (6) стартирайки от основно конститутивно уравнение, за разлика от подхода използван в оригиналното изследване [1], където експоненциалната функция и релаксационното време τ , при формулирането на дифузионния коефициент, са включени *ad hoc* в дифузионното уравнение.

Първият, и най-важен, момент в следващия анализ е проблемът, че уравнението Додсън е чисто параболично с нефизична безкрайна скорост на разпространение на потока, без да се отчитат релаксационни процеси при неговото разпространение в средата. С цел яснота на изложението, нека не разбираме погрешно това мнение, като имаме в предвид, че уравнението на Додсън дефинира релаксационно време $\tau = 1/\beta$, но само за коефициента на дифузия.

Вторият основен проблем в това изследването е получаването на нова форма на уравнението на Додсън, представена чрез оператора на Caputo-Fabrizio. Целта е да получи формулировка, която е по-обща от оригиналната и нейното получаване да се основава на конститутивни уравнения; а освен това, да може да се редуцира до модела от цял порядък, когато релаксацията на потока не се взема под внимание.

Проведеното изследването води до формулиране на два модела:

Модел с единична памет (Single-memory model).

Това е модел с едно релаксационно време, който може лесно да бъде получен от конститутивното уравнение на Cattaneo [16]. Този модел ясно показва как оригиналното уравнение на Додсън може да се получи чрез основна връзка *поток-градиент* и масов баланс.

Модел с две памету (Two-memories model).

Този модел използва дефиницията на нова сложна релаксационна функция (new composite relaxation function), която отчита едновременно процеси на релаксация за *големи* и *малки* времена (long-time and short-time processes of relaxation).

2. ПРЕДВАРИТЕЛНА ИНФОРМАЦИЯ

2.1. Конститутивно уравнение на Cattaneo и следствия то него

Дифузионните процеси на маса, като правило, се представят като следствие на закона за запазване на масата

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x} \quad (7)$$

Допускането, че масовия поток $j(x,t)$ е пропорционален на концентрационния градиент $j(x,t) = -D_0 \partial C(x,t)/\partial x$, всъщност дефинира коефициента на дифузия D_0 . След това прилагайки (7) ние получаваме класическото дифузионно уравнение (уравнение на Фик) (8),

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_0 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (8)$$

Основният недостатък на модела (8) е нефизичната безкрайна скорост на разпространение на потока.

За избягване на този недостатък Cattaneo [16] дефинира релаксационна функция водеща до крайна скорост на разпространение на дифузионния поток (топлопроводност) в твърди тела, като обобщение на закона на Фурие: чрез

линейна суперпозиция на потока на топлина и неговата производна по време свързана с неговата история [17,18]. Следователно, съгласно тази концепция, потокът j се дефинира чрез конститутивно уравнение [16] използващо интеграл с памет.

$$j(x, t) = - \int_0^t R(x, t-s) \nabla C(x, t-s) ds \quad (9)$$

Ако $R(x, t)$ е делта функция на Dirac $\delta(s)$, така

че $\int_0^t \delta(s) ds = 1$, то това води до класическото

уравнение Фик (Фурие) (8), тъй като отсъствува демпфиращ ефект при разпространение на потока. От друга страна,

обаче, ако $R(x, t)$ зависи само от времето, то може да се представи като разтеглено експоненциално ядро (а stretched-exponential kernel) [1,16] $R(t) = \exp(-(t-s)/\tau)$, където релаксационното време τ е крайно, т.е. $\tau = \text{const}$. Тогава, от масовия баланс (17) се получава уравнението на Cattaneo [16]

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} \left[- \frac{D_0}{\tau} \int_0^t \exp \left[- \left(\frac{t-s}{\tau} \right) \right] \frac{\partial C(x, s)}{\partial x} ds \right] \quad (10)$$

За $\tau \rightarrow 0$ уравнението на (10) се редуцира до уравнението на Фик.

Една апроксимация от първи порядък по отношение на τ [19], развита като (11), ни позволява да получим диференциално уравнение от първи порядък (12), а именно

$$j(x, t + \tau) = -D_0 \frac{\partial C(x, t)}{\partial x},$$

$$j(x, t + \tau) \approx j(x, t) + \tau \frac{\partial j(x, t)}{\partial x} \quad (11)$$

$$\frac{1}{\tau} j(x, t) + \frac{\partial j(x, t)}{\partial t} = - \frac{D_0}{\tau} \frac{\partial C(x, t)}{\partial x} \quad (12)$$

Интегрирането на (12) води до

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = \beta D_0 \int_0^t e^{-\beta(t-s)} \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} ds, \quad \beta = \frac{1}{\tau} \quad (13)$$

След това въведение, ние трябва да обърнем специално внимание на интеграла с памет в (13). Целта е да ги свържем с интегралите с несингулярни ядра на дробния оператор на Caputo-Fabrizio [20,21,23,24,25, 26,27,28,29,30,31,32,33 ,34,35].

3. КЪМ ИЗВОДА НА УРАВНЕНИЕ НА ДОДСЪН С НЕСИНГУЛЯРНА ПАМЕТ

3.1. Модел с единична памет

Сега, нека използваме дефинициите на уравнението на Cattaneo, като конститутивни уравнения относно дифузионния поток. С цел простота на изложението, разглеждаме несмутена среда с натоварване по маса на границата $x = 0$, при следните начални и гранични условия

$$C(x, 0) = C(0, 0) = C(\infty, t) = C_x(x, 0) = C_{xx}(x, 0) = 0, \quad C(0, t) = C_s \quad (14)$$

След това, в уравнение (13) използваме означението $F(x, t) = \partial^2 C(x, t) / \partial x^2$. Тогава (14)

$$\text{имаме } F(x, 0) = \partial^2 C(x, 0) / \partial x^2 = 0.$$

Интегрирането (по части) на дифузионния член в (13) води до

$$\begin{aligned} & \beta \int_0^t e^{-\beta(t-s)} \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} ds = \\ & (1 - e^{-\beta t}) \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} + \beta \int_0^t e^{-\beta(t-s)} \left[\frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 C(x, s)}{\partial x^2} \right] ds \end{aligned} \quad (15)$$

Вторият член в дясната страна на (15) съвпада с конструкцията на оператора на Caputo-

Fabrizio. Както беше показано в Глава 3.1 и Глава 3.2, тази конструкция може да се представи като

$$\begin{aligned} & \beta \int_0^t e^{-\beta(t-s)} \frac{\partial^2 C(x, s)}{\partial x^2} ds = \\ & = D_0 (1 - e^{-\beta t}) \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} + \\ & + D_0 (1 - \alpha) \frac{1}{1 - \alpha} \int_0^t e^{\frac{-\alpha}{1-\alpha}(t-s)} \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial^2 C(x, s)}{\partial x^2} \right] ds \end{aligned} \quad (16)$$

Накрая, новата форма на уравнение (13) е

$$\begin{aligned} \frac{\partial C(x, t)}{\partial t} &= D_0 (1 - e^{-\beta t}) \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} + \\ & + D_0 (1 - \alpha) {}_{CF} D_t^\alpha \left[\frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} \right] \end{aligned} \quad (17)$$

За $t=0$, когато практически няма релаксационен процес ($\tau \approx 0 \Rightarrow \beta \rightarrow \infty$) получаваме $D_0 (1 - e^{-\beta t}) \approx D_0$. и дифузионният коефициент приема своята максимална стойност D_0 . След това, $D_0 (1 - e^{-\beta t})$ може да се представи като $D_0 e^{-\beta t} \left(\frac{1 - e^{\beta t}}{e^{-\beta t}} \right)$. В случаите, когато $\beta t = t/\tau \ll 1$ ние можем да апроксимираме линейно експоненциалният член $e^{-\beta t} \approx 1 - \beta t$ и следователно $(1 - e^{-\beta t})/e^{-\beta t}$ се апроксимира като $\beta t/(1 + \beta t) \approx O(1)$. Следователно, с допускането $\beta t = t/\tau \ll 1$ получаваме

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} \approx D_0 e^{-\beta t} \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} + D_0 (1 - \alpha) {}_{CF} D_t^\alpha \left[\frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} \right] \quad (18)$$

Първият член в дясната страна на (18) съвпада с дифузионния член в уравнението на Додсън. За $\alpha=1$, формално ние получаваме

уравнението на Додсън (6). Това твърдение, обаче, трябва отчита факта, че при $\beta \rightarrow \infty$ имаме $\alpha \rightarrow 1$ и $\tau \rightarrow 0$. Следователно, от резултатите получени в тази точка следва, че уравнението на Додсън е апроксимация съответстваща на условието $\beta t = t/\tau \ll 1$ ($\alpha \rightarrow 1$).

3.2. Модел с две релаксационни ядра

3.2.1. Основно допускане (Conjecture)

Тук конституираме уравнение за потока

$$j_a = \int_0^t R_a(t, \tau_0, \tau_s) [\partial C / \partial x] dt, \quad \text{със сложна}$$

релаксационна функция (а composite memory kernel), представено със следното конститутивна зависимост

$$\begin{aligned} R_a(t) &= e^{-\beta_0(t-s)} (1 - e^{-\beta_s(t-s)}) = \\ &= e^{-\frac{(t-s)}{\tau_0}} \left(1 - e^{-\frac{(t-s)}{\tau_s}} \right) = \quad, \quad \beta = \beta_0 + \beta_s \quad (19) \\ &= e^{-\beta_0(t-s)} - e^{-(\beta_0 + \beta_s)(t-s)} \end{aligned}$$

Тази сложна релаксационна функция е произведение на експоненциално ядро за големи времена $e^{-\beta_0(t-s)}$ и изчезваща памет за къси времена (short-time fading function) $(1 - e^{-\beta_s(t-s)})$.

В уравнение (19) τ_0 и τ_s са релаксационни времена на процеси с голям период (large-time) и с къс (short-time) период на релаксация, съответно.

3.2.2. Апроксимация на интеграла с памет

Сега, следвайки идеята и условията наложени от основното допускане, апроксимирането на интеграла със сложна памет е както следва

$$\begin{aligned}
 & (\beta_0 + \beta_s) \int_0^t \left[e^{-\beta_0(t-s)} - e^{-(\beta_0 + \beta_s)(t-s)} \right] F(x, s) ds \approx \\
 & \approx \beta_0 \int_0^t e^{-\beta_0(t-s)} F(x, s) ds - \beta_s \int_0^t \left[e^{-\beta_s(t-s)} \right] F(x, s) ds \\
 & F(x, t) = \partial^2 C(x, t) / \partial x^2 \quad (20)
 \end{aligned}$$

След това, ние можем да повторим техниката на интегриране по части в дясната страна на (20), така както беше направено при модела с единична памет, но сега за всеки интеграл по-отделно. При това, нека помним, че с условието $\beta_s \gg \beta_0$ коефициентът на първия член в дясната страна на (41) може да се апроксимира като $e^{-\beta_0 t} - e^{-\beta_s t} \approx e^{-\beta_0 t}$ защото $e^{-\beta_0 t} \gg e^{-\beta_s t}$.

След тези начални апроксимации, новото уравнение, с две ядра на памет, прескачайки дългите изчисления, е

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = D_0 \left[P(x, t, \alpha) - Q(x, t, \alpha) \right] \quad (21)$$

където

$$\begin{aligned}
 P(x, t, \alpha) = & (1 - e^{-\beta_0 t}) \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} + \\
 & + (1 - \alpha_0) {}_{CF} D_t^{\alpha_0} \left[\frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} \right] \quad (22)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 Q(x, t, \alpha) = & (1 - e^{-\beta_s t}) \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} + \\
 & + (1 - \alpha_s) {}_{CF} D_t^{\alpha_s} \left[\frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} \right] \quad (23)
 \end{aligned}$$

Когато нестационарните процеси с малки релаксационни времена се пренебрегнат, т.е., когато $\alpha_s = 1$, ние получаваме модела с единична памет. Освен това, когато релаксацията на масовия поток е изцяло пренебрегната в модела, т.е., когато $\alpha_0 = \alpha_s = 1$, ние получаваме класическото уравнение на Додсън от цял порядък (6) със затихващ дифузионен

коефициент. Това не противоречи на факта, че експоненциалният член $e^{-\beta_0 t}$ остава, когато $\alpha_0 = \alpha_s = 1$. Този момент ще бъде специално коментиран за случаите, когато стойностите α_0 и α_s трябва да бъдат определени.

Отрицателният знак пред члена моделиращ процесите с късо релаксационно време, просто съответствува на факта, че кратковременните релаксации, ако те съществуват, ускоряват цялостния преходен процес. За да бъдем по-ясни, нека видим конструкцията на сложната релаксационна функция с две ядра и логическата причина за нейното създаване.

3.3. Дробният порядък: как да бъде определен?

Определянето на дробния порядък α е от особена важност, защото получените модели трябва да бъдат прилагани при решаване на реални проблеми, или поне при числени симулации. Следователно, естественият въпрос е: *Как да се изчисли дробният порядък α , ако параметрите на процеса като D_0 , a и τ са известни?* Нека започнем с модела с единична памет, като инструктивен пример.

Дефиницията на разтеглената експоненциална функция $\exp[-\beta(t-s)]$ сочи директно, че размерността на β е $[1/s]$. Но от друга страна, дробният порядък α няма размерност, а дефиницията на скоростната константа $\beta(\alpha) = \alpha/(1-\alpha)$ е с размерност $[1/s]$, по-точно отношението $(1-\alpha)/\alpha$ е с размерност

на време. Сега, основният въпрос е: *как този конфликт трябва да бъде разрешен?*

За да отстраним проблема, ние дефинираме временен мащаб с помощта на началните условия на дифузионния процес. С изходната стойност на дифузионния коефициент D_0 и мащаба за дължина a (ние използваме означенията на Додсън [1]), за областта където протича процеса, ние дефинираме *характеристичното дифузионно време* (*characteristic diffusion time*) е $t_D = a^2/D_0$. Следователно времето t може да бъде мащабирано (обезразмерено) като $\bar{t} = t/t_D = D_0 t/a^2$. Всъщност, безизмерното време t/t_D е числото на Фурие $Fo = D_0 t/a^2$ дефинирано посредством началната стойност на дифузионния коефициент D_0 . Сега, ние се обръщаме към разтеглената експоненциално функция, която може да бъде обезразмерена като

$$\begin{aligned} \exp[-\beta_0(t-s)] &= \exp\left[-\frac{(t-s)}{\tau_0}\right] = \\ &= \exp\left[-\left(\frac{t_D}{\tau_0}\right)(\bar{t}-\bar{s})\right] \end{aligned} \quad (24)$$

Следователно, от дефиницията за дробния порядък α_0 получаваме

$$\frac{\alpha_0}{1-\alpha_0} = \frac{t_D}{\tau_0} = \frac{1}{{}_0De} = \beta_0 t_D \Rightarrow \alpha_0 = \frac{1}{1+\tau_0/t_D} \quad (25)$$

или в еквивалентна форма

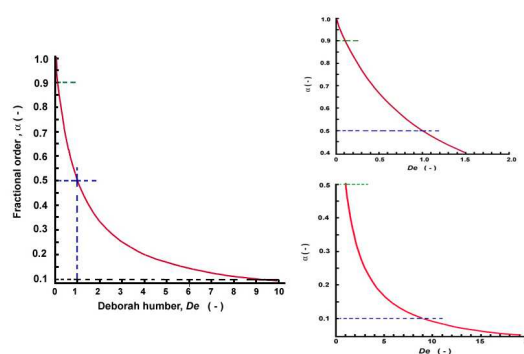
$$\alpha_0 = \frac{1}{1+\frac{\tau_0 D_0}{a^2}} = \frac{1}{1+\frac{D_0}{\beta_0 a^2}} = \frac{1}{1+{}_0De} < 1 \quad (26)$$

Отношението $\tau_0/t_D = \tau_0 D_0/a^2 = {}_0De$ е числото на Deborah за макроскопският (големи времена) дифузионен процес с релаксация и неговата

дефиниция е по аналогия нелинейната (non-Fickian diffusion) дифузия в сложни системи [41,42]. Следователно, с известни стойности на a, τ_0 и D_0 ние можем да определим стойността ${}_0De$, а след това да изчислим α_0 . Ако не съществува процес на релаксация в системата, то тогава за $\tau_0 = 0$ имаме ${}_0De = 0$, а от там $\alpha_0 = 1$.

Аналогично, за кратковременните процеси на релаксация с известна стойност на $\tau_s = 1/\beta_s$ ние можем да определим стойността на $\alpha_s = 1/(1+{}_sDe)$.

Графиките на **Фиг.1** показват функционалната връзка $\alpha = \alpha(De)$. Ясно е, че най-често използваната за симулации стойност $\alpha = 0.5$ съответствува на $De = 1$, т.е. когато релаксационното време е равно на характеристичното дифузионно време на системата, т.е. $\tau = a^2/D_0$.



Фиг.1. Функционална връзка $\alpha = \alpha(De)$ дефинираща дробния порядък като функция на числото на Deborah.

Функционалните зависимости (25) и (26) са твърде информативни от физична гледна точка и могат да бъдат конструктивни примери при интерпретацията на явленията представени чрез

модела. В допълнение, аналогичен подход свързващ параметрите на процеса и стойността на дробния порядък за случая на стационарна дифузия на топлина и пространствена памет представена чрез производна от типа на Caputo-Fabrizio вече е използван в [40] (Глава 3.3).

ИЗВОДИ

Тази глава демонстрира едно ново извеждане на интегро-диференциално уравнение с дробен оператор на Caputo-Fabrizio, използващо за изходно уравнение конститутивното съотношение на Cattaneo с експоненциално ядро. Този модел се редуцира до дробното уравнение на Додсън с експоненциално затихващ дифузионен коефициент.

Един основен резултат, получен в това изследване, е директната връзка между параметъра на дробния порядък и числото на Deborah (дефинирано като отношение на релаксационното време на процеса и характеристичното дифузионно време.

Предложен е един нов модел с две ядра на памет отговарящи за процеси на релаксация с големи и малки релаксационни времена, съответно. Той се редуцира до модел с единична памет, ако краткотрайните релаксационни процеси се пренебрегнат.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Dodson, M.H., Closure temperature in cooling geochronological and petrological systems, *Cont. Mineral., and Petrol.*, 40 (1973),3, pp. 259-274.
- [2] Dodson, M.H., *Theory of cooling ages*, In : Lectures in Isotope Geology, E. Jaeger and J.C.Hunziker, Singer, Berliinn Heidelberg , 1979, pp. 194-202.

- [3] Zang, Y. Diffusion in mineral and melts: Theoretical background, *Rev. Min. and Geochem.*, 72 (2010), 1, 5-59.
- [4] Ganguly, J., Tirone, M., Diffusion closure temperature and age of a mineral with arbitrary extent of diffusion: theoretical formulation and applications, *Earth. Plant Sci. Lett.*, 170 (1999), 1-2, pp.131-140.
- [5] Liang, Y., A simple model for closure temperature of a trace element in cooling bi-mineralic systems, *Geochimica et Cosmochimica Acta* 165 (2015),September, pp.35–43
- [6] McInnes, B.I.A., Evans, N.J., Fu, F.Q., Garwin, S., Application of Thermochronology to Hydrothermal Ore Deposits, *Rev. Mineral. & Geochem*, 58 (2005) ,1., pp. 467-498, 2005.
- [7] Ganguly, J., Cation Diffusion Kinetics in Aluminosilicate Garnets and Geological Applications, *Reviews in Mineralogy & Geochemistry*, 72 (2010),November, pp. 559-601.
- [8] Crank, J. , *Mathematics of Diffusion*,2nd ed., 1975,
- [9] Carslaw,H.S., Jaeger,J.C., *Conduction of Heat in Solids*, Oxford University Press, London, 1959.
- [10] Goodman, T.R, The heat balance integral and its application to problems involving a change of phase, *Transactions of ASME*, 80 (1958), 1-2, pp.335-342.
- [11] Goodman T.R., Application of Integral Methods to Transient Nonlinear Heat Transfer, *Advances in Heat Transfer*, T. F. Irvine and J. P. Hartnett, eds., 1 (1964), Academic Press, San Diego, CA, pp. 51–122.
- [12] Hristov J., Integral solutions to transient nonlinear heat (mass) diffusion with a power-law diffusivity: a semi-infinite medium with fixed boundary conditions, *Heat Mass Transfer*, 52 (3) (2016) , pp.635-655
- [13] Hristov J. The heat-balance integral method by a parabolic profile with unspecified exponent: Analysis and Benchmark Exercises, *Thermal Science* 13(2009) , 2, pp.27-48
- [14] Mitchell, S.L., Myers, T.G., Application of heat balance integral methods to one-dimensional phase change problems, *Int. J. Diff. Eqs.*, volume 2012, Article ID 187902, doi: 10.1155/2012/187902.
- [15] Hristov, J . The non-linear Dodson diffusion equation: Approximate solutions and beyond with formalistic fractionalization, *Math. Natur. Sci*, 1 (2017) ,1, pp.1-17;
- [16] Cattaneo, C, On the conduction of heat (In Italian), *Atti Sem. Mat. Fis. Universit'a Modena*, 3 (1948),1, pp. 83–101.
- [17] Carillo, S., Some Remarks on Materials with Memory: Heat Conduction and Viscoelasticity, *J. Nonlinear Math. Phys.*, 12 (2005), Suppl. 1, pp. 163–178.

- [18] Ferreira, J.A., de Oliveira, P., Qualitative analysis of a delayed non-Fickian model, *Applicable Analysis*, 87(2008), 8, pp. 873–886.
- [19] Araujo, A., Ferreira, J.A., Oliveira, P., The effect of memory terms in diffusion phenomena, *J. Comp. Math.*, 24 (2000), 1, 91-102.
- [20] Caputo, M., Fabrizio, M., A new definition of fractional derivative without singular kernel, *Progr. Fract. Differ. Appl.*, 1 (2015), 2, pp. 73-85.
- [21] Podlubny, I., *Fractional Differential Equations*, Academic Press, New York, 1999.
- [22] Caputo, M., Fabrizio, M., Applications of new time and spatial fractional derivatives with exponential kernels, *Progr. Fract. Differ. Appl.*, 2 (2016), 2, pp. 1-11.
- [23] Gómez-Aguilar, J.F., Yépez-Martínez, H., Calderón-Ramón, C., Cruz-Orduña, I., Fabricio Escobar-Jiménez, R., Hugo Olivares-Peregrino, V., Modeling of a Mass-Spring-Damper System by Fractional Derivatives with and without a Singular Kernel, *Entropy*, 17 (2005), pp. 6289-6303; doi:10.3390/e17096289
- [24] Atangana, A., Nieto, J.J., Numerical solution for the model of RLC circuit via the fractional derivative without singular kernel, *Advances in Mechanical Engineering*, 7 (2015), 10, pp.1–7,
- [25] Atangana, A., Badr, S.T.A. Analysis of the Keller–Segel model with a fractional derivative without singular kernel, *Entropy*, 17(2015), pp. 4439-4453; doi: 10.3390/e17064439
- [26] Atangana, A., Badr, S.T.A., New model of groundwater flowing within a confine aquifer: application of Caputo–Fabrizio derivative, *Arabian Journal of Geosciences*, January 2016, 9:8, doi: 10.1007/s12517-015-2060-8
- [27] Sheikh, N.A., Ali, F., Saqib, M., Ilyas Khan, Syed Aftab Alam Jan, A comparative study of Atangana-Baleanu and Caputo-Fabrizio fractional derivatives to the convective flow of a generalized Casson fluid, *Eur. Phys. J. Plus* (2017) 132: 54. doi:10.1140/epjp/i2017-11326-y
- [28] Devendra KUMAR, Jagdev SINGH, Baleanu,D., Modified Kawahara equation within a fractional derivative with non-singular kernel, *Thermal Science*, 2017, in press: DOI: DOI:10.2298/TSCI160826008K.
- [29] Alsaedi, A., Baleanu,D. Sina Etemad,S., Shahram Rezapour, S. On Coupled Systems of Time-Fractional Differential Problems by Using a New Fractional Derivative, *J. Function Spaces*, v. 2016, Article ID 4626940, doi: 10.1155/2016/4626940.
- [30] Losada, J., Nieto, J. J., Properties of a New Fractional Derivative without Singular Kernel, *Progr. Fract. Differ. Appl.*, 1 (2015), 2, pp. 87-92.
- [31] Devendra Kumar, Jagdev Singh, Dumitru Baleanu, Maysaa Al Qurashi, Analysis of logistic equation pertaining to a new fractional derivative with non-singular kernel, *Advances in Mechanical Engineering* 2017, Vol. 9(2) 1–8 ; Hossein Jafari, Atena Lia, Haleh Tejadodi, Dumitru Baleanu, Analysis of Riccati Differential Equations within a New Fractional Derivative without Singular Kernel, *Fundamenta Informaticae* (IOS Press) 151 (2017) 161–171;
- [32] J.F. Gómez-Aguilar, H. Yépez-Martínez, J. Torres-Jiménez, T. Córdova-Fraga, R.F. Escobar-Jiménez, V.H. Olivares-Peregrino, Homotopy perturbation transform method for nonlinear differential equations involving to fractional operator with exponential kernel, *Advances in Difference Equations*, (2017), 2017:68 ;doi 10.1186/s13662-017-1120-7.
- [33] A.Atangana, D.Baleanu, New fractional derivatives with nonlocal and non-singular kernel: theory and application to heat transfer model, *Thermal Science*, 20 (?) (2016)- On-line First ; DOI:10.2298/TSCI160111018A
- [34] D. Baleanu, T. Abdeljawad, Discrete fractional differences with non-singular discrete Mittag-Leffler kernels, *Advances in Difference Equations*, (2016), 2016:232; doi: 10.1186/s13662-016-0949-5
- [35] Ilknur Koca , Abdon Atangana, Solutions of Cattaneo-Hristov model of elastic heat diffusion with Caputo-Fabrizio and Atangana-Baleanu fractional derivatives , *Thermal Science* (2016) – in press , doi:10.2298/TSCI160102102M
- [36] T. M. Atanacković, S. Pilipović, B. Stanković, D. Zorica, *Fractional Calculus with Applications in Mechanics: Vibrations and Diffusion Processes*, ISTE Ltd and John Wiley & Sons, Inc., 2014.
- [37] Hristov J., Transient Heat Diffusion with a Non-Singular Fading Memory: From the Cattaneo Constitutive Equation with Jeffrey’s kernel to the Caputo-Fabrizio time-fractional derivative, *Thermal Science*, 20 (2) (2016), pp.765-770.;
- [38] Joseph, D.D., Preciozi,L., Heat waves, *Rev.Mod. Phys.*, 61 (1989), 1, pp. 41-73
- [39] Hristov J., Steady-State Heat Conduction in A Medium with Spatial Non-Singular Fading Memory: Derivation of Caputo-Fabrizio space-fractional derivative with Jeffrey’s kernel and analytical solutions, *Thermal Science*, 21 (2017),2, pp. 827-839
- [40] Vrentas, J.S., Jarzebski, C.M., Duda, J.L., A Deborah number for diffusion in Polymer-Solvent systems, *AIChE J.*, vo.21, no.5, (1975), pp.894-901.
- [41] Wu,J.C., Pepas, N., Modeling penetrant diffusion in glassy polymers with an integral sorption Deborah number, *J. Poly, Sci.-Part B*, vol.31 (1993),11, pp. 1503-1518.

ГЛАВА 3.5

ФОРМАЛНА ФРАКЦИОНАЛИЗАЦИЯ НА ДИФУЗИОННОТО УРАВНЕНИЕ¹

Тази глава поставя за разглеждане някои въпроси свързани с формалната фракционализация на дифузионното уравнение при използване на дробния оператор (производна) на Caputo-Fabrizio и адекватността на получените резултати. Използвани са аналогии от областта на дифузионните уравнения моделирани чрез дробни производни със сингулярни ядра и резултати представени в предхождащите глави.

1. ВЪВЕДЕНИЕ

Голяма част от примерите отнасящи се до формалната фракционализация на моделните уравнения бяха представени по-рано (в Глава 3.1) като това е основният подход използван до сега в литературата. Малък пример беше показан на края на Глава 3.4. Развитието на изводите на дифузионните уравнения, при използване на конститутивното уравнение на Cattaneo, естествено води до използването на дробен оператор (производна) на Caputo-Fabrizio. В тази глава ние показваме няколко примера и възможните резултати при формално фракционализиране на дифузионното уравнение.

2. ФОРМАЛНО ДИФУЗИОННО УРАВНЕНИЕ В ТЕРМИНИ НА ПРОИЗВОДНАТА НА CAPUTO-FABRIZIO.

¹ Публикувано като: **Част 4** от **Hristov J., FRACTIONAL DERIVATIVE WITH NON-SINGULAR KERNELS: From the Caputo-Fabrizio definition and beyond: Appraising analysis with emphasis on diffusion models, Chapter 10, in Frontiers in Fractional Calculus, 2017 , vol. 1, S. Bhalekar, Ed. , Bentham, 2017, pp.270-342.**

2.1. Примери идващи от дробно-диференциалните модели със сингулярни ядра и последващ формализъм

Нека разгледаме класическото уравнение на Фик (Фурие). В този случай чрез проста смяна

$${}_C D_t^\alpha u(x, t) = D \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad (1)$$

Този модел може просто да се получи от уравнението за баланс на маса, ако то се запише *ad-hoc* като конститутивно уравнение, а именно

$${}_C D_t^\alpha u(x, t) = - \frac{\partial j}{\partial x} \quad (2a)$$

В този случай връзката поток-градиент трябва да бъде представен чрез интеграл с памет (2b)

$$j(x, t) = - \int_{-\infty}^t R(x, t) \nabla C(x, t-s) ds \quad (2b)$$

, където демпфиращата функция δ е делта функция на Dirac, т.е. $R(x, t) = R(t) = \delta_D$.

Ние трябва да помним, обаче, че дифузионния процес се причинява от наличието на градиент на концентрацията (температурата), който е причина масовия поток да дифундира през средата. Следователно, формите (1) и (2) противоречат на основната идея, още от времето на Maxwell, **че именно потокът трябва да бъде демпфиран, а не концентрацията (температурата).**

Използвайки формализма на (1) и (2), потокът може да се дефинира също и като адвекция, което веднага води да демпфирана версия на уравнението с адвекция и дифузия [1], уравнението на Korteweg-de-Vries-Burgers [2], уравнението на Hunter-Saxon [3] и уравнението на Burgers [4], а именно

$${}_c^c D_t^\alpha u(x, t) = \nu_f \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} - 2u(x, t) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} - \mu_f \frac{\partial^3 u(x, t)}{\partial x^3} \quad (3)$$

$${}_c^c D_t^\alpha u(x, t) = -u(x, t) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} + \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} - \lambda u(x, t) \quad (4)$$

Аналогичен подход води до демпфирано уравнение на Keller-Segel за хемотаксис [5], моделите на Allen-Cahn [6] и уравнението за дифузия на кислород [7].

Сега, основният възникващ въпрос е: *Дали тази фракционализация е адекватен подход за моделиране или само позволява да се имитират вече съществуващи модели? (Is this fractionalization techniques presents a reasonable modelling approach or simply allows mimicking already existing models?).*

За да отговорим на този въпрос, нека си припомним, че същата ситуация съществува с дифузионните уравнения със сингулярна памет. В този случай имаме две версии на субдифузионното уравнение [8]

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = {}_{RL} D_t^{1-\mu} \left[D_\mu \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \right], \quad x \in \mathfrak{R} \quad t \in \mathfrak{R}, \quad u(x, 0^+) = u_0(x) \quad (5)$$

където ${}_t D^{1-\mu} = {}_t D^1 I_t^\mu$ е дробната производна на Riemann-Liouville (RL) от порядък $1-\mu$ и

$${}_c D_t^\mu u(x, t) = D_\mu \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad (6)$$

с дробна по време производна на Caputo. И в двата случая D_μ има размерност $m^2 s^{-\mu}$.

Тези две версии на модела възникват асимптотично от модела на CTRW, с време на очакване представено като степенна функция (power-law waiting times), а може да се разглеждат и като модели субординирани на стохастичния процес описван от Брауновото движение [8].

Уравнение (6) може да се получи феноменологично чрез комбиниране на конститутивното уравнение (7a) и *ad-hoc* дефиниция на дробен закон на Фик (7b)

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x} \quad (7a)$$

$$j(x, t) = -D_\mu \left[{}_0 D_t^{1-\mu} \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right] \quad (7b)$$

Дробният интеграл в (7b) е претеглена средна стойност на концентрационния градиент върху предхождаща му история [8]. Още повече, използвайки (7a) или (5) ние можем да получим (1), както във всички коментирани до сега модели с производна на Riemann-Liouville (или с такава на Caputo при нулеви начални условия) (виж уравнения (3) и (4) защото дробната производна на Riemann-Liouville е ляво инверсна на дробния интеграл. Само, че такива зависимости между оператора (производната) на Caputo-Fabrizio и нейния асоцииран интеграл не съществуват.

2.2. Примери, които допускат зависимости поток-градиент в смисъл на Caputo-Fabrizio

Сега, инспирирани *ad-hoc* от дробно-диференциалната версия на закона на Фик (7b), нека допуснем, че дробната производна е тази дефинирана от Caputo-Fabrizio и ние можем за напишем интуитивно

$$j_{cf}(x,t) = -D_0 \left[{}^{RL}_{cf} D_t^{1-\alpha} \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} \right], \alpha \in [0,1] \quad (8a)$$

където ${}^{RL}_{cf} D_t^{1-\alpha}$ е дефинирана чрез оператор (производна) на Caputo-Fabrizio от тип Riemann-Liouville

$${}^R D_t^\alpha f(t) = \frac{1}{1-\alpha} \frac{d}{dt} \int_a^t f(s) \exp \left[-\frac{\alpha}{1-\alpha} (t-s) \right] ds \quad (8b)$$

От дефиницията (8a) и (8b) ние можем да получим, че

$$\begin{aligned} {}^{RL}_{cf} D_t^{1-\alpha} f(x,t) &= \\ \frac{1}{1-\alpha} \int_0^t \exp \left[-\frac{1-\alpha}{1-(1-\alpha)} (t-s) \right] f(x,s) ds &= \end{aligned} \quad (9)$$

$$= \frac{1}{1-\alpha} \int_0^t \exp \left[-\frac{1-\alpha}{\alpha} (t-s) \right] f(x,s) ds$$

Следователно, с $M(\alpha) = 1$ ние получаваме от (9), че

$${}^{RL}_{cf} D_t^{1-\alpha} f(x,t) = \frac{\alpha}{1-\alpha} {}_0 I^\alpha f(x,t), \alpha \in [0,1] \quad (10a)$$

В тази нова зависимост ${}_0 I^\alpha f(x,t)$ се дефинира чрез (10b)

$${}_0 I^\alpha f(t) = \frac{1}{\alpha} \int_0^t f(s) \exp \left(-\frac{1-\alpha}{\alpha} (t-s) \right) ds, \alpha \in [0,1] \quad (10b)$$

така както е конституирано от Caputo and Fabrizio [9]. Освен това, мащабирането на характеристичното дифузионно време на процеса t_D ясно показва, че множителят в дясната страна на уравнение (10a) е $\alpha/(1-\alpha) = 1/De$, където $De = \tau/t_D$ е числото на Deborah.

Следователно от конститутивното уравнение (8a) се получава

$$\begin{aligned} {}^{RL}_{cf} D_t^{1-\alpha} \left[\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} \right] &= \frac{\alpha}{1-\alpha} {}_0 I^\alpha \left[\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} \right] = \\ &= \frac{1}{1-\alpha} \int_0^t \exp \left[-\frac{1-\alpha}{\alpha} (t-s) \right] \left[\frac{\partial u(x,s)}{\partial x} \right] \end{aligned} \quad (11)$$

Следователно, ad-hoc формулираният закон на Fick в термини на производната на Caputo-Fabrizio може да се представи във вида (12)-(14)

$$j_{cf}(x,t) = -D_0 \frac{\alpha}{1-\alpha} {}_0 I^\alpha \left[\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} \right] \quad (12)$$

$$j_{cf}(x,t) = -D_0 \frac{\alpha}{1-\alpha} \int_0^t \exp \left[-\frac{1-\alpha}{\alpha} (t-s) \right] \left[\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} \right] \quad (13)$$

$$j_{cf}(x,t) = -D_0 \frac{1}{De} \int_0^t \exp \left[-\frac{1-\alpha}{\alpha} (t-s) \right] \left[\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} \right] \quad (14)$$

Сега, прилагайки процедурата от точка 2.1.1 на Глава 3.1, или по-точно точка 4 на Глава 3.4, ние получаваме следното дифузионно уравнение

$$\begin{aligned} \frac{\partial C(x,t)}{\partial t} &= D_0 \frac{1}{\alpha} \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} + \\ &+ \frac{1-\alpha}{\alpha} \left[\frac{1}{\alpha} \int_0^t \frac{\partial C(x,s)}{\partial x} \exp \left(-\frac{1-\alpha}{\alpha} (t-s) \right) ds \right] \end{aligned} \quad (15)$$

Това е уравнение (64) от Глава 3.4, получено от Caputo and Fabrizio [9], което се отличава от уравнение (1).

В същия контекст, ние можем да дефинираме интуитивно една ad-hoc зависимост, а именно

$$j_{Cat}^\alpha(x,t) = -D_0 \left[{}_{cf} D_t^{-\alpha} \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} \right] \quad (16)$$

където ${}_{cf} D_t^{-\alpha} f(x,t)$ се дефинира като

$${}_{cf} D_t^{-\alpha} = \frac{1-\alpha}{\alpha} \int_0^t \exp \left[-\frac{\alpha}{1-\alpha} (t-s) \right] f(x,s) ds \quad (17)$$

Дефиницията (17) е на интеграл с памет формулиран от Cattaneo и използван в уравнение (20) получено в Глава 3.4, а именно

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[-\frac{D_0}{\tau} \int_0^t \exp \left[-\left(\frac{t-s}{\tau} \right) \right] \frac{\partial C(x,s)}{\partial x} ds \right] \quad (18)$$

Тогава, от (16), конститутивната зависимост е

$$j_{\text{Catt}}^{\alpha}(x,t) = -D_0 \frac{1-\alpha}{\alpha} \int_0^t \exp \left[-\frac{\alpha}{1-\alpha} (t-s) \right] \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} ds \quad (19)$$

и Глава 3.4 имаме $(1-\alpha)/\alpha = \tau/t_D = De$.

В допълнение, ако зависимостта *поток-градиент* се дефинира чрез ядро на Jeffrey, то ние можем да запишем *ad hoc*

$$j_{\text{Jeff}}^{\alpha}(x,t) = -D_0 \left[1 + {}_{CF}D_t^{-\alpha} \right] \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} \quad (20)$$

Тогава, както беше демонстрирано в Глава 3.2, резултатът е следното уравнение (виж уравнение (15) в Глава 3.2).

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = \nu_1 \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} + \nu_2 (1-\alpha) {}_{CF}D_t^{\alpha} \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} \quad (21)$$

3. НЯКОИ КОМЕНТАРИИ ВЪРХУ ФОРМАЛНАТА ФРАКЦИОНАЛИЗАЦИЯ

Тези прости примери отправят апел към внимателно прилагане на основните физични закони и адекватни допускания, когато дробно-диференциални версии на известни модели се разглеждат чрез директната замяна да временната производна от цял порядък с дробна такава е в основата на новия модел. В този момент, ние се обръщаме към мнението на Hilfer [10], че: **дефиницията на дробната производна е проблемно ориентирана задача, т.е. дефинициите се отнасят за различни по своя характер релаксационни процеси и**

съответните дробни оператори са различни в различните класове от функции.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Baleanu, D., Agheli, B., Al Qurashi, M.M., Fractional advection differential equation with Caputo-Fabrizio derivatives, *Adv. Mech. Eng.*, vol.8, pp.1-8, 2016.
- [2] Goufo, E.F.D., Application of the Caputo-Fabrizio fractional derivative without singular kernel to Korteweg-de Vries-Berges Equation, *Math. Model. Anal.*, vol.21, no.2, pp.188--198, 2016.
- [3] Gomez-Aguilar, J.F., Atangana, A., Fractional Hunter-Saxton equation involving partial operators with bi- order in Riemann-Liouville and Liouville-Caputo sense, *Eur. Phys. J. Plus*, vol.132:100, 2017; doi: 10.1140/epjp/i2017-11371-6.
- [4] Singh, J., Kumar, D., Al Qurashi, M., Baleanu, D., Analysis of a new fractional model for damped Burgers equation, *Open Physics*, vol.15, pp.35-41, 2017; doi: 10.1515/phys-2017-0005.
- [5] Atangana, A., Alkahtani, B.S.T., Analysis of Keller-Segel model with a fractional derivative without singular kernel, *Entropy*, vol.17, pp.4439-4453, 2015; doi: 10.3390/e17064439.
- [6] Algahtani, O.J.J., Comparing Atangana-Baleanu and Caputo-Fabrizio derivative with fractional order: Allen Cahn model, *Chaos, Solitons, Fractals*, vol.89, August, pp.552-559, 2016; doi: 10.1016/j.chaos.2016.03.026.
- [7] Alkahtani, B.S., Algahtani, O.J., Dubey, R.S., Goswami, P., Solution of fractional oxygen diffusion problem having without singular kernel, *J. Nonlinear Sci. Appl.*, vol.10, pp.299-07, 2017; doi: 10.22436/jnsa.010.01.28.
- [8] Henry, B.I., Langlands, T.A., Straka, P. An Introduction to Fractional Diffusion, in Dewar, R.L. and Detering, F., eds., *Complex Physical, Biophysical and Econophysical Systems*, Proc. 22nd Canberra International Physics Summer School, The Australian National University, Canberra, 8-19 December 2008, edn. World Scientific Lecture Notes in Complex Systems, Vol. 9, World Scientific, Hackensack, NJ, pp. 37--89, 2010.
- [9] Caputo, M.C., Fabrizio, M., Applications of new time and spatial fractional derivatives with exponential kernels, *Progr. Fract. Differ. Appl.*, vol.2, no.1, pp.1--11, 2016.
- [10] Hilfer, R., *Applications of fractional calculus in physics*, World Scientific, Singapore, 2000.

Глава 3.6

КАКВИ РЕЛАКСАЦИОННИ ПРОЦЕСИ СЕ МОДЕЛИРАТ С НЕСИНГУЛЯРНА¹ ЕКСПОНЕНЦИАЛНА ПАМЕТ И НОВИТЕ ДРОБНИ ОПЕРАТОРИ (ПРОИЗВОДНИ)?

Тази глава анализира типа памет моделирана с несингулярни експоненциални ядра и как новите производни (оператори) кореспондират с реални физични процеси. Това е още обект интензивна дискусия в литературата, така че тази глава дава една а възможна интерпретация на проблема използвайки за база поведението на разтеглената експоненциална функция на Kohlrausch .

1. ВЪВЕДЕНИЕ

Естественият въпрос възникващ от разглеждането на проблемите в предишните глави може да се формулира като: Каква е връзката на новия *интегрален оператор*

$${}_C D_t^\alpha f(t) = \frac{1}{1-\alpha} \int_0^t \exp\left[-\frac{\alpha(t-s)}{1-\alpha}\right] \frac{df(s)}{ds} ds, \quad (1)$$

ad hoc наречен *дробна производна* [1,2], с реални физични проблеми?

В същност, в първата статия по този проблем [1], където (1) е *постулирана*, има малък параграф поясняващ, че този интегрален оператор, с несингулярна памет, е ориентиран към моделиране на релаксационни процеси в нови материали. Независимо от това, от наша гледна точка, това обяснение не беше достатъчно,

¹ Публикувано като: Част 5 на **Hristov J.** Fractional derivative with non-singular kernels From the Caputo-Fabrizio definition and beyond: Appraising analysis with emphasis on diffusion models, Chapter 10, in *Frontiers in Fractional Calculus*, 2017 , vol. 1, S. Bhalekar, Ed., Bentham, Publ. 2017, pp.270 - 342.

за да се обясни на общността занимаваща се с математическо моделиране, за която физиката зад моделните уравнения не е на първо място, че новият интегрален оператор е ориентиран към моделиране на процеси, които се различават от тези, където се използва добре познатата сингулярна изчезваща паметта, представяна чрез степенна функция. За нещастие, нито една от последвалите публикации (с изключение на [1,2,3,4,5] не се фокусира върху физиката на моделирания процес, където този нов интегрален оператор се прилага. Още повече, лавината от статии, използващи подхода на формална фракционализация, предизвиква негативна реакция (мнение породено от мои персонални комуникации) сред групите с достатъчно дълъг опит в класическото дробно диференциално моделиране (със сингулярна изчезваща памет). Много от свойствата на дробните производни, познати от тази добре развита област, не се наблюдават при новия интегрален оператор (1):

- **Първо, не съществува добре дефиниран асоцииран интеграл;**
- **Второ, полу-груповите свойства, познати от производните на Caputo, тук не съществуват.**
- Още повече, **тази производна не е ляво инверсна на известния асоцииран интеграл**, свойство, което ние знаем от класическото дробно смятане.

Всичките тези моменти предизвикват следния въпрос: *Какво, в същност, този нов интегрален оператор моделира и какво ние не можем да видим от вече познатото от класическите дробни производни?*

Просто казано, отговорът е: този интегрален оператор с експоненциална памет, наречен *дробна производна с несингулярно ядро*, е ориентиран към релаксационни процеси с много по-сложно поведение от това, което обикновено се моделира с дробните производни с класически ядра (степенна памет). В следващите точки на тази глава ние ще се опитаме да обясним тази гледна точка.

2. ЕКСПОНЕНЦИАЛ НА KOHLRAUSCH КАТО РЕЛАКСАЦИОННА ФУНКЦИЯ

Преди всичко, ние фокусираме вниманието върху експоненциалното ядро в (1), което е добре познатата релаксационна функция на Kohlrausch (виж следващото уравнение (2) моделиращо не-експоненциално релаксационно и не-степенно поведение [6,7]).

Най-широко използваната функция, описваща релаксационно поведение във временната област, е разтегления експоненциал (stretched exponential) на Kohlrausch [6]

$$\Phi_K(t) = \exp\left[-(At)^{\alpha_K}\right] \quad (2)$$

Тук $0 < \alpha_K < 1$ е разтегляща експонента (stretching exponent), а A характеристична временна константа.

Съответстващата функция на отговор (response function), представена чрез отрицателната производна по време от $\Phi_K(t)$, демонстрира кратковременно степенно поведение (short-time power-law behaviour) и разтеглено експоненциално затихване при големи времена [6], а именно

$$f_k = -\frac{d}{dt}\Phi_K(t) \equiv \begin{cases} t^{\alpha_K}, & t \rightarrow 0 \\ e^{-(At)^{\alpha_K}}, & t \rightarrow \infty \end{cases} \quad (3)$$

Следвайки анализа в [6], ние можем да фокусираме вниманието си върху тези асимптотични поведения на релаксационната функция $\Phi_K(t)$.

Исторически, в самото начало на опитите за описание на релаксационните процеси във временната област, най-използваната функция е класическият експоненциал на Debye, с различни релаксационни времена [6,8]. Това релаксационно поведение може да се представи математически като претеглено в средно експоненциално затихване $\exp(-t/\tau)$, по отношение на разпределението $g(\tau)$ от едно случайно релаксационно време T_r [6]. По този начин, до голяма степен, се описва най-общо стохастичната природа на транспортните характеристики на кондензираната среда

$$\Phi(t) = \exp(-t/T_r) \quad (4)$$

Теорията на вероятностите позволява (4) да се представи в интегрална форма [9]

$$\Phi(t) = \left\langle e^{-\frac{t}{\tau}} \right\rangle = \int_0^\infty e^{-\frac{t}{\tau}} g(\tau) d\tau \quad (5)$$

Тук $T_r = \tau \in [0, \infty)$ и вероятността $g(\tau) d\tau$ са *ефективното релаксационно време* и *функцията на плътността на вероятност* (the effective relaxation time probability density function (pdf)).

Функцията на Kohlrausch (2) е ядро описващо най-често експерименти [10,11,12] свързани с намаляваща флуоресцентна интензивност, където за $\Phi_K(t)$ се използва

символа $I_f(t)$. В този смисъл, както отбелязват Berberan-Santos et al. [11], Експоненциалното затихване може да се представи чрез неговото развитие в ред, което в общ вид е

$$e^{-at} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-at)^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-at)^n}{\Gamma(n+1)} \quad (6)$$

Както добре знаем, представянето (10) е специален случай на функцията на Mittag-Leffler

$$E_{\gamma}(-at) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-at)^n}{\Gamma(\gamma n + 1)} \quad (7)$$

за $\gamma=1$, често използвана за моделиране на експоненциално затихваща флуоресцентна интензивност [11] (виж Глава A2 относно свойствата на функцията на Mittag-Leffler).

В същия контекст, експоненциалната функция на (Heaviside exponential function) $e_{\alpha}(x)$ [11,13]

$$e_{\gamma}(-at) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-at)^n}{\Gamma(n+1+\gamma)}, \quad 0 < \gamma \leq 1 \quad (8)$$

а и нормализираната експоненциална функция на Heaviside $\mathcal{E}_{\gamma}$

$$\mathcal{E}_{\gamma}(x) = \Gamma(1+\gamma)e_{\gamma}(x) = \mathcal{H}(\gamma)e_{\gamma}(x) \quad (9)$$

също се използва за описание на експериментални данни за затихваща флуоресцентна интензивност [11,13].

Функцията $g(\tau)$ в интегралната формула (5), обикновено се отбелязва като $H(\tau)$, е обратна трансформация на Лаплас от $\Phi_K(t)$ и се нарича *спектр на собствените стойности* (eigenvalue spectrum) (на съответната кинетична матрица) [11]. Тя се нормализира като $\Phi_K(0)=1$, което означава, че

$$\int_0^{\infty} H(\tau) d\tau = 1; \text{ както беше отбелязано по-горе, тя}$$

е **pdf** на уравнение (5). Формите на $H(\tau)$ за тези две затихващи функции (релаксации) са известни и те са реални функции на плътности на разпределение [11] дефинирани като

$$H_{\gamma}(\tau)_{\text{Mittag-Leffler}} = \gamma^{-1} \tau^{-\left(1+\frac{1}{\gamma}\right)} L_{\gamma}(\tau^{-\frac{1}{\gamma}}) \quad (10)$$

Тук $L_{\gamma}(x)$ едностранно разпределение на Levy (one-side Levy **pdf**). За $H(\tau)$ имаме, че

$$H_{\gamma}(\tau)_{\text{Heaviside}} = \begin{cases} \gamma(1-\tau)^{\gamma-1}, & \text{if } \tau \leq 1 \\ 0, & \text{if } \tau > 1 \end{cases} \quad (11)$$

Двете обобщени експоненциални функции затихват асимптотично по закона t^{-1} [11,14].

Съгласно [11,15] съществуват поне два практически подхода за обобщение експоненциалната затихваща функция:

1) Да се избере фамилия $H(\tau)$ **pdf**, която може да се редуцира до делта функция на Dirac при някои стойности на параметрите, едно свойство, което се наблюдава при разпределеният на Gauss и Lorentz. Тази процедура автоматично осигурява, че избраната $H(\tau)$ е **pdf**.

2) Вторият подход разглежда използването на модифицирана експоненциална функция, (като се променят параметрите): това е случаят на разтегления експоненциал на Kohlrausch. Този подход изисква предварителен компютърен тест на $H(\tau)$ и проверка дали тя е **pdf** или не. По-нататък, Berberan et al. [11] специално обръщат внимание на случая, когато се използва разлагане в ред на експоненциално затихващата функция (и нейни модификации).

След всички тези коментари е напълно естествено, след конструирането на интегралния оператор (производна) на Caputo-Fabrizio с проста експоненциална памет (2) (в този случай

експонентата на Kohlrausch е $\alpha_k = 1$), този процес да бъде повторен (по аналогия) със заместване на простото експоненциално ядро с функцията на Mittag-Leffler. Подобна логика, комбинираща добре познатото сингулярно ядро $t^{-\mu}$ и функцията на Mittag-Leffler води до производната на Atangana с двоен порядък.

Както беше споменато по-горе, изборът на ядрото в интеграла с памет е обектно ориентиран проблем, а извличането на информацията за релаксационната функция от експериментални данни и уточняването на параметрите е задача строго зависеща от физиката на изследвания (моделирания) процес. Ние специално обръщаме внимание върху тази гледна точка, защото дефиницията на уравнение (1) не идва от вакуума на вселената, а от реални физични процеси. В този контекст, ние посочваме статията на Caputo [16] и примерите в Глава 3.7.

3. ЕКСПОНЕНЦИАЛНО ЯДРО НА CAPUTO-FABRIZIO: Какъв тип изчезваща памет се моделира?

Сега, нека се обърнем отново към експоненциалното ядро, за което беше показано в Глава 3.4, че $\tau/t_D \equiv (1-\alpha)/\alpha = De$, където De е числото на Deborah. Условието $\tau \rightarrow 0$ отговаря на $\alpha \rightarrow 1$ и $De \rightarrow 0$, а следователно релаксационната функция се приближава (като поведение) към делта функцията на Dirac.

С асимптотично степенно поведение за малки времена, разтегленият експоненциал на Kohlrausch се приближава асимптотично към ядрото на класическия дробен интеграл [17]. Още

повече, когато $\alpha_k = 1$, то следва, че за големи стойности на b и малки релаксационни времена ($\tau \rightarrow 0$) имаме $g_k(\tau) = 1$, а тогава от (8) следва, че $\rho_k(b) \equiv 1/b^2$ за $b \rightarrow \infty$.

Важно е да се отбележи, че поведението като степенна функция на релаксационното ядро, познато още като алгебрично затихване $\Phi_K(t) \propto (t/\tau)^{-\gamma}$ [18] се наблюдава при релаксация на напреженията във вискозоеластични материали [19] и се моделира със слаби ядра на изчезваща памет (weak principle of the fading memory) (WFM). Последното означава, че скорошните (най-близките до началото на процеса) стойности на релаксационната функция (memory kernel) в областта 0^+ или асимптотично за $t \rightarrow 0$ са много по-значими за крайния резултат (the output) отколкото отдалечените стойности ($t \rightarrow \infty$) [19].

Обаче, както е отбелязано от Fabrizio и Morro [19], ако съществува функция на влияние (influential function) $k(s)$ (която затихва монотонно за големи стойности на s , така че $\lim s^{\alpha_F} k(s) = 0$, когато $s \rightarrow \infty$) и порядъка е $\alpha_F > n+1$, то тогава отговорът (response functional) $u_F(t) = F(\phi^t)$, за подходящ набор от исторически стойности (suitable set of histories) ϕ^t , до време t , се дефинира като гладка функция, n -пъти диференцируема по Frechet, в областта с нулева история в пространството S^k . По-нататък, ако реална функция k в R^{++} е $k(s) > 0$, практически навсякъде в R^{++} и $k \in L^1(R^+)$, то тогава функциите (16a,b)

$$\begin{aligned}\bar{K}(\tau) &:= \text{ess. sup}_{s \in R^{++}} \frac{k(s+\tau)}{k(s)} \quad \text{и} \\ \underline{K}(\tau) &:= \text{ess. sup}_{s \in R^{++}} \frac{k(s)}{k(s+\tau)} \quad (12a,b)\end{aligned}$$

се дефинират и имат крайни стойности върху R^+ . Като следствие, тогава съществуват положителни числа a_F, b_F и c_F , такива, че върху R^{++} имаме [19]

$$a_F \exp(-b_F s) < k(s) < c_F, \quad sk(s) \rightarrow 0 \text{ for } s \rightarrow \infty \quad (17)$$

Както се коментира от Berberan et al.[11]

скоростната временна константа f_k (виж уравнение (3)) е

$$f_k = -\frac{d}{dt} \ln[\Phi_K(t)] = \frac{\alpha_K}{\tau_0} \left(\frac{t}{\tau_0} \right)^{\alpha_K - 1} \quad (13)$$

където $0 < \alpha_K < 1$ и $\tau_0 = 1/A$ е характеристикното релаксационно време.

Едно интересно свойство (използвайки свойствата на f_k) на тази функция е, че съществуват два режима на релаксационно поведение [11]:

- 1) Едно начално затихване, което е по-бързо от експоненциалното поведение (faster than-exponential (FTE), по отношение на експоненциалното релаксационно време τ_0 и f_K е неограничена (infinite) за $t = 0$.
- 2) Затихване, по-бавно от експоненциалното поведение (slower than-exponential (STE), по отношение на релаксационното време τ_0 , за времена по-големи от τ_0 .

Тези два режима на затихване са *твърде различни при малки стойности на α_K , но са практически неразличими за $\alpha_K \rightarrow 1$* , както това се наблюдава при с експоненциалното ядро използвано при дефиницията на (1). Разтеглената експоненциална функция на затихване има *нежеланото затихващо поведение при малки*

времена (undesirable short-time pattern) поради неограничената начална скорост (т.е. FTE режим) [11], но както знаем, същото поведение се наблюдава и при степенната функция на затихване.

При анализ на релаксация в диелектрици [20], съществува универсално поведение независимо от природата на материала моделирано с дробна степенна функция за малки и големи времена [20] като

$$f_k = -\frac{d\phi}{dt} = \begin{cases} (t/\tau_0)^{-\sigma_1} & \text{for } t \ll \tau_0 \\ (t/\tau_0)^{-\sigma_2-1} & \text{for } t \gg \tau_0 \end{cases} \quad (14)$$

където $\sigma_1 < 1$ и $0 < \sigma_2$

Със свободата да избираме различни релаксационни функции в интегралния оператор на Caputo-Fabrizio (1), ще бъде възможно да се конструират адекватни дробни оператори ориентирани към моделиране на специфични проблеми.

Следователно, ние можем да направим предположението, че експоненциалното ядро на оператора на Caputo-Fabrizio (1) с $\alpha_K = 1$ и независеща от времето $f_K = 1/\tau_0$ съответствува, по-точно има свойствата, на **силен принцип на затихваща памет** (to account the *strong principle of the fading memory*), за **големи времена**, за разлика от случая на **слабата затихваща памет (WFM) моделирана със степенна функция**.

В допълнени, ние можем да направим заключението, въз основата на съществуващите примери използващи формална фракционализация, че: ако силна затихваща памет (strong fading memory **SFM**) се моделира с интегралния оператор (1), то е резонно е да се

очаква, че свойствата демонстрирани от дифузионните уравнения използващи дробни производни с слаба памет (**WFM**) **да не се възпроизвеждат адекватно чрез оператора използващ SFM**. Следователно, крайно необходим е сериозен анализ на физиката на процесите, позволяващи да бъдат моделирани с който и да е от тези два принципа на затихваща памет (WMF или SMF), чрез адекватен интегрален оператор.

Простата операция „copy-paste”, чрез механична смяна на вида на дробната производна при формалистична фракционализация, не е коректният подход.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Caputo, M.C., Fabrizio, M., A new definition of fractional derivative without singular kernel, *Progr. Fract. Differ. Appl.*, vol.1,no.1 pp.73--85, 2015.
- [2] Caputo, M.C., Fabrizio, M., Applications of new time and spatial fractional derivatives with exponential kernels, *Progr. Fract. Differ. Appl.*, vol.2,no.1, pp.1--11, 2016
- [3] Hristov, J., Transient Heat Diffusion with a Non-Singular Fading Memory: From the Cattaneo Constitutive Equation with Jeffrey's kernel to the Caputo-Fabrizio time-fractional derivative, *Thermal Science*, vol. 20, no.2, pp.765--770, 2016.
- [4] Hristov, J., Steady-State Heat Conduction in A Medium with Spatial Non-Singular Fading Memory: Derivation of Caputo-Fabrizio space-fractional derivative from Cattaneo concept with Jeffrey's kernel and analytical solutions, *Thermal Science*, vol.21,no.2,pp.827-839,2017.
- [5] Hristov, J., Derivation of fractional Dodson's equation and beyond: Transient mass diffusion with a non-singular memory and exponentially fading-out diffusivity, *Progr. Fract. Differ. Appl.*, vol.3, in press, 2017.
- [6] Trzmiel, J., Weron, K., Janczura, J., Placzek-Popko, E., Properties of the relaxation time distribution underlying the Kohlrausch-Williams-Watts photoionization of DX centers in $Cd_{1-x}-Mn_xTe$ mixed crystals, *J Phys: Condens. Matter*, vol. 21, no34:345802, 2009; doi: 10.1088/0953-8984/21/34/345801
- [7] Jonscher, A.K. *Universal relaxation law*, Chelsea Dielectric Press, London, 1996.
- [8] Boetcher, C.J., Bordewijk, P., *Theory of Electric polarization*, vol. 2, Elsevier, Amsterdam, 1978
- [9] Feller, W., *An introduction to probability theory and its appreciations*, Wiley, New York, 1996.
- [10] Souchon, V., Leray, I., Berberan-Santos, M.M., Valeur, B., Multichromophoric supermolecular systems,. Recovery of the distributions of decay times from fluorescence decays, *Dalton Trans.*, vol.2009,no.20, pp.-3988- 3992,2009.doi: 10.1039/b900263.
- [11] Berberan-Santos, M.N., Bodunov, E.N., Valeur, B., Luminescence decays with underlying distributions of rate constants: General properties and selected cases, In: *Fluorescence of Supramolecules, Polymers, and Nanosystems*, Berberan-Santos, M.N., Ed., Springer Ser. Fluorescence, vol.4, pp.67-103, 2008; doi:10.1007/4234\2007_001.
- [12] Berberan-Santos, M.N., Valeur, B., Luminescence decays with underlying distribution: General properties and analysis with mathematical functions., *J. Lumin*, v.126,no.2, pp.263-272, 2007.
- [13] Wintner, A., On Heaviside's and Mittag-Leffler's generalizations of the exponential function, the symmetric stable distributions of Cauchy-Levy, and properties of Gamma-function, *Math. Pure Appl*, IX, 38: pp. 165-182, 1959.
- [14] Berberan-Santos, M.N., Bodunov, E.N., Valeur, B., Mathematical functions for the analysis of luminescence decays with underlying distributions. 1. Kohlrausch decay function (stretched exponential), *Chemical Physics*, vol.315,no.1-2, pp.171-182, 2005.
- [15] Berberan-Santos, M.N., Valeur, B., Mathematical functions for the analysis of luminescence decays with underlying distributions: 2. Becquerel (compressed hyperbola) and related decay functions, *Chemical Physics*, vol.317,no.1, pp.57-62, 2005.
- [16] Caputo, M.C., The unknown set of memory constitutive equations of plastic media, *Progr. Fract. Differ. Appl.*, vol.2,no.2, pp.77-83, 2016.
- [17] Podlubny, I., *Fractional Differential Equations*, Academic Press, New York, 1999.
- [18] Schiessel, J., Blumen, A., Hierarchical analogues to fractional relaxation equations, *J. Phys. A: Math. Gen.*, vol. 26, no.19, pp. 5057-5069, 1993.
- [19] Fabrizio, M., Morro, A., *Mathematical problems in linear viscoelasticity*, SIAM, Philadelphia, 1992.
- [20] Lim, S.C., Li, M., A generalized Cauchy process and its application to relaxation phenomena, *J. Phys. A: Math. Gen.*, vol.39, pp.2935-2951, 2006; doi:10.1088/0305-4470/39/12/005.

ЧАСТ 3

ДИФУЗИОННИ МОДЕЛИ С НЕСИНГУЛЯРНА ИЗЧЕЗВАЩА ПАМЕТ

ОСНОВНИ РЕЗУЛТАТИ И ПРИНОСИ

Основните резултати на изследванията представени в **Част 3** са свързани с изводи на дифузионни модели с несингулярна (експоненциална) памет, където демфиращият ефект е представен чрез интегрален оператор на Caputo-Fabrizio. Показано е как този дробен интегрален оператор възниква чрез конститутивно уравнение *поток-градиент*, използващо постановката (концепция) на Cattaneo, чрез интеграл с експоненциална памет.

Този коментар важен е за обобщение на получените резултати, отчитайки динамиката и бързото развитие на проблемите в тази нова област. След публикуването на основните резултати, включени в **Част 3** (Глава 3.2, Глава 3.3 и Глава 3.4) и обобщаващия анализ в Hristov (2017), представен тук в Глава 3.5, Глава 3.6 и Глава 3.7, трябва изрично да се отбележи, че интегралният оператор на Caputo-Fabrizio **не е дробна производна** (Ortigueira and Machado, 2017; Tarasov, 2018), в смисъл, които се използва при производните на Riemann-Liouville и Caputo, за разлика от операторите с ядро на Mittag-Leffler (Baleanu and Fernandez, 2017; Tarasov, 2018).

Независимо от това, този интегрален оператор (Ortigueira and Machado, 2017), който не е нелокален (Tarasov, 2018), възниква при модели с експоненциална демпфираща функция (виж началото на Глава А3) и трябва да се употребява адекватно на физическата основа на моделирания процес, а не като производна от общ характер, както беше нееднократно отбелязано в Глава 3.5, дискутираща критично проблемите с формалната фракционализация на моделите (виж също Глава 4.2 в следващата Част 4).

J.Hristov (2017) Derivatives with non-singular kernels: From the Caputo-Fabrizio definition and beyond: Appraising analysis with emphasis on diffusion models, Chapter 10, in *Frontiers in Fractional Calculus*, 2017, S. Bhalekar, Ed., Bentham Science Publishers 2017, pp.270-342.

M. D. Ortigueira, J. T. Machado (2017), A critical analysis of the Caputo-Fabrizio operator, *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, (2017), doi:[10.1016/j.cnsns.2017.12.001](https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2017.12.001)

D.Baleanu, A. Fernandez (2017), On some new properties of fractional derivatives with Mittag-Leffler kernel, *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*(2017), doi:[10.1016/j.cnsns.2017.12.003](https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2017.12.003)

V. E. Tarasov (2018), No nonlocality. No fractional derivative, *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation* (2018), doi:[10.1016/j.cnsns.2018.02.019](https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2018.02.019)

1. ОСНОВНИ РЕЗУЛТАТИ

Глава 3.2: Това е първият извод на уравнение за нестационарна дифузия чрез ядро на Jeffrey показващо естествено възникване на демпфиращ член с интегрален оператор, съвпадащ с формулировката Caputo-Fabrizio.

Глава 3.3: Формулирани са модел с пространствена памет и пространствен интегрален оператор (понякога наричан механично *производна*) с експоненциално ядро, от тип Caputo, и са представени аналитични решения за случай на стационарна дифузия. Дефинирана е връзка между геометричния размер на участъка с пространствена памет и дробния параметър на интегралния оператор.

Глава 3.4 Направен е извод на дробно-диференциален модел на Додсън чрез конститутивен подход свързващ потока и градиента, посредством интеграл с експоненциална памет, в постановка на Cattaneo. Формулиран е дифузионен модел със сложна памет, включваща едновременно релаксационни ефекти за големи и малки времена. Дефинирана е функционалната връзка между дробния параметър и дифузионното число на Deborah.

Глава 3.5 Анализиран е проблема с формалната фракционализация на дифузионното уравнение и възникващите противоречия, когато производната по време в класическия модел на Фурие (Фик) се замени формално с производната (по време) с оператора на Caputo-Fabrizio.

Глава 3.6 Направен анализ на основния проблем: какъв тип памет се моделира чрез експоненциалното ядро използвано в оператора на Caputo-Fabrizio? Използван е обобщения модел на разтеглената експоненциална функция на Kohlrausch.

Глава 3.7 Представени са модели на реални проблеми, където експоненциалната релаксационна функция е получена експериментално или в резултат на развитие на модел. Това дава основание за по-нататъшно развитие на този тип модели, чрез нови формулировки използващи на интегралния оператор на Caputo-Fabrizio.

2. ОСНОВНИ ПРИНОСИ

1. Направени са изводи на едномерни дифузионни модели с временна (**Глава 3.2**) и пространствена (**Глава 3.3**) памет използвайки конститутивен подход на Cattaneo с експоненциална памет по време и пространство, съответно.
2. Показано е как интегралният оператор на Caputo-Fabrizio възниква естествено под формата на демпфиращ член в дифузионно уравнение (**Глава 3.2** и **Глава 3.3**).
3. Получени са аналитични решения за случай на стационарна дифузия с пространствена експоненциална памет (**Глава 3.3**).
4. Направен е нов извод на дробно-диференциален модел на Додсън, чрез конститутивен подход свързващ потока и градиента, чрез интеграл с експоненциална памет (**Глава 3.4**). Показано е, че този обобщен модел се редуцира до известното уравнение на Додсън при големи времена на релаксация.
5. Дефинирана е функционалната връзка между дробния параметър на интегралния оператор с физичните параметри характеризиращи дифузията в средата: връзка на дробния параметър с дифузионното число на Deborah (**Глава 3.4**) и геометричната характеристика за зоната с пространствена памет (**Глава 3.3**).

Част 4

НЯКОИ ПРИЛОЖЕНИЯ: ПРИМЕРИ

Кратко представяне

ЧАСТ 4

НЯКОИ ПРИЛОЖЕНИЯ: ПРИМЕРИ

ПРЕДГОВОР

Тази част на дисертацията представя решенията и анализа на 6 приложни задачи, където се прилагат техниките на решения разработени в предхождащите глави. Тези изследвания са отделени в специална част, защото в тях се смесват различни модели (с различни диференциални оператори и нелинейности) и подходи за решение. Независимо от това, при всички от тях като основен инструмент, е използван интегралния метод за решение, позволяващ да се получи оценка за основните характеристики на моделирания дифузионен процес. При тази организация, представянето на главите се получава по-стройно изложение на резултатите от проведените изследвания.

ЧАСТ 4 е организирана по следния начин:

1. Глава 4.1 изследва уравнението на Додсън в неговото изходна формулировка и провежда експерименти с формална фракционализация. За приближените решения е използван метода на интегралния баланс. Получено е също и точно автомоделно решение, което се различава от това на Додсън (възпроизведено в книгата на Crank). Експериментите с формалната фракционализация са проведени с производни на Riemann-Liouville, Caputo и Caputo-Fabrizio. Анализирана е адекватността на формалната фракционализация чрез резултатите на приближените решения.

2. Глава 4.2 дискутира проблема за формалната фракционализация на модели, с примера на нестационарно течение (първа задача на Стокс) на флуид на Casson и физическата адекватност на този подход. Това изследване е провокирано от големия брой статии публикувани в последните две години след постановката на Caputo-Fabrizio за дробен оператор с несингулярна памет. Направен е критичен анализ на използваните до този момент модели. Проведени експерименти чрез формална фракционализация и дефиниране на конститутивни уравнения. Получени са приближени решения за случаите на модели от цял порядък и дробно-диференциални аналози, и е анализирана физическата адекватност на резултатите.

3. Глава 4.3 представя решение на първата задача на Стокс, чрез метод на двойно интегриране, когато релаксацията се моделира със смесена производна по време-пространство. Разгледани са два основни

случая: модел от цял порядък и дробно-диференциален модел. За модел, чрез който е показана ефективността на DIM, е използвано уравнението на ненютонов флуид от втори клас (second-grade fluid).

4. Глава 4.4 представя ефективно интегрално решение на нелинейното дифузионно уравнение на радиационен топлообмен. Използвана е техниката на DIM и метода развит в **Глава 1.2** за три основни примера: скок в повърхностната температура, експоненциално във времето гранично условие (задача на Marshak) и степенно гранично условие по време (ramp) (задача на Garnier).

5. Глава 4.5 разглежда дробно-диференциален модел от 4-ти порядък на повърхностна дифузия (субдифузия), като вариант на уравнението на Mullins. Получено е приближено интегрално решение чрез метода с многократно интегриране (MIM).

6. Глава 4.6 представя ново интегрално решение на задача свързана с кинетиката на дифузионно контролирана адсорбция (дифузионен контрол в макропорите на адсорбента), моделирана чрез квадратична нелинейност на Fujita (модел на Ruthven) и водеща до правоъгълни изотерми на Лангмюр.

ГЛАВА 4.1

ДИФУЗИОННО УРАВНЕНИЕ НА ДОДСЪН¹

Приближени решения и експерименти с формална фракционализация

Анализирано е нелинейното дифузионно уравнение на Додсън, с експоненциално затихващ дифузионен коефициент, чрез приближени решения, използващи метода на интегралния баланс. Методът на интегралния баланс е използван както за модела от цял порядък така и за формално фракционализираните модели. Формалната фракционализация използва заместване на производната по време производна с друга дробно-диференциална версия, със сингулярно (Riemann-Liouville or Caputo) или с несингулярно ядро на изчезващата памет. Получените решения позволяват да се види една нова страна на уравнението на Додсън и да се отделят формално фракционализираните модели с производната на Caputo-Fabrizio. Методът на интегрален баланс позволява да се свържат дробният порядък и релаксационното време, като адекватни характеристики на моделирания процес.

1. ВЪВЕДЕНИЕ

1.1. Дифузионно уравнение на Додсън

Възникването на дифузионното уравнение на Додсън (1) е свързано с моделиране на дифузия в минерали [1,2], при изследване на историята на охлаждане на скалите в геологията

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = D_0 e^{-\beta t} \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2}, \quad \beta = 1/\tau \quad (1)$$

където дифузията в твърдите тела е термично промотиран (активиран) процес [3,4]. Същият подход е свързан и други дифузионни процеси в модерни материали [5,6].

¹ Публикувано като: **Hristov, J.** The non-linear Dodson diffusion equation: Approximate solutions and beyond with formalistic fractionalization, *Mathematics in Natural Sciences*, 1 (1) (2017), pp. 1-17; <http://dx.doi.org/10.22436/mns.01.01.01>

Основите на това уравнение бяха разгледани в Глава 3.4 и за това ние ще прескочим тази уводна част

1.2. Формулиране на проблема

Настоящото изследване фокусира вниманието си върху получаването на приближени решения (и техния адекватен анализ) на уравнението на Додсън представено в общ вид като

$$\frac{\partial^\mu C(x,t)}{\partial t^\mu} = D_0 e^{-\beta t} \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} \quad (2)$$

В представянето (2) временната производна $\partial^\mu C(x,t)/\partial t^\mu$ може да бъде ляво инверсна производна на Riemann-Liouville или Caputo, със сингулярно ядро или оператор (производна) на Caputo-Fabrizio derivative с експоненциално несингулярно ядро.

2. ДИФУЗИОННО УРАВНЕНИЕ НА ДОДСЪН ОТ ЦЯЛ ПОРЯДЪК

2.1. Приближени решения

2.1.1. Решение чрез НВІМ

С трансформацията $u = 1 - e^{-\beta t}$ водеща до $\partial C/\partial t = (\partial C/\partial u)(\partial u/\partial t) = (\partial C/\partial u)(\beta e^{-\beta t})$ ние можем да представим (1) във вида

$$\frac{\partial C(x,u)}{\partial u} = \frac{D_0}{\beta} \frac{\partial^2 C(x,u)}{\partial x^2} \quad (3)$$

Тогава интегралното съотношение (28) за НВІМ е

$$\frac{d}{du} \int_0^\delta C(x, u(t)) dx = -\frac{D_0}{\beta} \frac{\partial C(0, u(t))}{\partial x} \quad (4)$$

Приемайки апроксимиращ профил като парабола с недефинирана експонента

$C_a(x, u(t)) = C_s(1 - x/\delta)^n$ и за яснота на изложението използвайки $C_s = 1$, заместването на $C(x, t)$ в (36) с $C_a(x, u(t))$ води следното обикновено диференциално уравнение [10]

$$\frac{1}{n+1} \frac{d\delta}{du} = \frac{D_0}{\beta} \frac{n}{\delta} \Rightarrow \delta^2 = \frac{D_0}{\beta} u [2n(n+1)] \quad (5)$$

В термини на оригиналните променливи, дълбочината на проникване $\delta(t)$ е

$$\delta = \sqrt{\frac{D_0}{\beta}} \sqrt{(1 - e^{-\beta t}) [2n(n+1)]} \quad (6)$$

Отношението D_0/β има размерност $[m^2]$, а функцията $1 - e^{-\beta t}$ расте във времето и се насища бързо до 1, когато за големи времена $1/e^{\beta t} \rightarrow 0$, т.е. $t \rightarrow \infty$. За тази екстремна ситуация получаваме $\delta \equiv \sqrt{D_0/\beta} = \text{const.}$, т.е. фронтът престава да се развива във времето и дифузионният процес спира.

3.1.2. Решение чрез DIM

Прилагайки интегралното съотношение на DIM към трансформираното уравнение (3) получаваме

$$\delta = \sqrt{\frac{D_0}{\beta}} \sqrt{(1 - e^{-\beta t})(n+1)(n+2)} \quad (7)$$

Безимерното отношение $\Delta_{DIM} = \delta / \sqrt{D_0/\beta}$ дефинира дефинира релаксационната функция $\sqrt{(1 - e^{-\beta t})}$.

3.1.3 Приблизени интегрални решения

От прилагането на техниките на HBIM и DIM ние имаме две приближени решения

$$C(x, t)_{HBIM} = \left(1 - \frac{x}{\sqrt{\frac{D_0}{\beta}} (1 - e^{-\beta t}) \sqrt{2n(n+1)}} \right)^n \quad (8)$$

$$C(x, t)_{DIM} = \left(1 - \frac{x}{\sqrt{\frac{D_0}{\beta}} (1 - e^{-\beta t}) \sqrt{(n+1)(n+2)}} \right)^n \quad (9)$$

Апроксимиращите профили (8) и (9) дефинират по естествен път една неконвенционална автомоделна променлива η_u

$$\eta_u = \frac{x}{\sqrt{\frac{D_0}{\beta}} u} = \frac{x}{\sqrt{\frac{D_0}{\beta}} (1 - e^{-\beta t})} \quad (10)$$

В пространството (x, u) решенията (8) и (9) имат познати оптимални стойности на експонентата n [7,8], а по-точно: за решението чрез HBIM $n_{opt(HBIM)} \approx 2.233$ и $n_{opt(DIM)} \approx 2.218$ за DIM. Това позволява да приемем, че решението, чрез интегралния метод, на този случай е завършено.

3.2. Точно решение чрез автомоделна променлива

Използвайки добре познатата технология на решенията чрез автомоделната променлива на Болцман ние дефинираме (инспирирани от решението чрез интегралния баланс и хомогенната форма (3) $\eta_u = x / \sqrt{D_\beta u}$, $D_\beta = D_0 / \beta$. Търсим решение във вида $C(x, u) = u^k g(\eta_u)$, където експонентата k и функцията $g(\eta_u)$ трябва да бъдат определени в процеса на

решението. С новата автомоделна променлива ние трансформираме (3) като

$$u^{k-1} \left(kg - \frac{1}{2} \eta_u \frac{dg}{du} - \frac{d^2 g}{du^2} \right) = 0 \quad (11)$$

От (11) получаваме уравнението, което трябва да бъде решено

$$\frac{d^2 g}{du^2} + \frac{1}{2} \eta_u \frac{dg}{du} = kg \quad (12)$$

Сега, ние използваме специалния случай за $k = 0$, което веднага води до

$$\frac{d^2 g}{du^2} + \frac{1}{2} \eta_u \frac{dg}{du} = 0 \Rightarrow \frac{dg}{du} = B \exp \left(-\frac{1}{4} \eta_u^2 \right) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow g(\eta_u) = B \int_{-\infty}^{\eta_u} \exp \left(-\frac{1}{4} \eta_u^2 \right) d\eta_u \quad (13)$$

където B трябва да бъде определено в процеса на решението.

Следователно, ние получихме добре познатото решение представено чрез функцията на грешката на Гаус $1 - \text{erf}(\eta_u/2)$. Независимо от това, обаче това решение среща сериозен проблем при обратната трансформация в оригиналните променливи в пространството (x, t) . Поради тази причина, дефинирайки променливата $Q = g \exp(\eta_u^2/4)$ ние трансформираме (13) във

$$\frac{d^2 Q}{du^2} - \frac{1}{2} \eta_u \frac{dQ}{du} = \left(k + \frac{1}{2} \right) Q \quad (14)$$

Тривиалното решение за $k = -1/2$ е $Q = b = \text{const.}$

От тази гледна точка получаваме, че

$$g(\eta_u) = b \exp \left(-\frac{1}{4} \eta_u^2 \right) \quad (15)$$

В пространството (x, u) решението е

$$C(x, u) = b \frac{1}{\sqrt{u}} \exp \left(-\frac{x^2}{4D_\beta u} \right) \quad (16)$$

След това, в термини $C(x, t)$ решението е

$$C(x, t) = b \frac{1}{\sqrt{1 - \exp(-\beta t)}} \exp \left(-\frac{x^2}{4D_\beta [1 - \exp(-\beta t)]} \right) \quad (17)$$

С $C(0, t) = C_s$ получаваме $b = C_s \sqrt{1 - \exp(-\beta t)}$.

Следователно, решението (с $C_s = 1$) е

$$C(x, t) = \exp \left(-\frac{x^2}{4D_\beta [1 - \exp(-\beta t)]} \right) \quad (18)$$

За големи времена стационарният профил е

$$C(x, \infty) = \exp \left(-\frac{x^2}{4D_\beta} \right) \quad (19)$$

Стационарното решение директно дефинира безизмерната променлива $x/\sqrt{D_\beta}$,

4. ФОРМАЛНО ФРАКЦИОНАЛИЗИРАНИ МОДЕЛИ

4.1. Решение чрез DIM

С решения чрез DIM, така че прилагайки ние имаме двоен интеграл от дробната производна спрямо профила $C_a = (1 - x/\delta)^n$

$$\int_0^\delta \left(\int_x^\delta \frac{\partial^\mu}{\partial t^\mu} C_a(x, t) dx \right) dx = J_2 = \int_0^\delta \left(\int_x^\delta \frac{\partial^\mu}{\partial t^\mu} \left(1 - \frac{x}{\delta} \right)^n dx \right) dx \quad (20)$$

Резултатът от интегрирането в (20) (виж Глава 2.1) не зависи от вида на използваната производна (Riemann-Liouville или Caputo), т.е

$$J_2 = \frac{\partial^\mu}{\partial t^\mu} \left[\frac{\delta^2}{(n+1)(n+2)} \right] \quad (21)$$

При нулево начално условие $\delta(t=0)$,

имаме, че $\frac{\partial^\mu}{\partial t^\mu} \delta^2(t) = {}_{RL} D_t^\mu \delta^2(t) = {}_C D_t^\mu \delta^2(t)$.

Следователно, дробното диференциално уравнение по отношение на $\delta(t)$, е

$$\frac{\partial^\mu}{\partial t^\mu} \left[\frac{\delta^2}{(n+1)(n+2)} \right] = D_0 e^{-\beta t} C(0, t) \quad (21)$$

С условието $C(0, t) = C_s = 1$, съответстващо на апроксимиращия профил $C_a = (1 - x/\delta)^n$ ние получаваме

$$\frac{\partial^\mu}{\partial t^\mu} \delta^2 = D_0 e^{-\beta t} N, \quad N = (n+1)(n+2) \quad (22)$$

За специалния случай, когато $\beta = 0$ ние имаме (Глава 2.1) следното решение

$$\delta^2 = D_0 N \frac{1}{\Gamma(1+\mu)} t^\mu \quad (23)$$

и фронт еволюиращ по закона $\delta \equiv \sqrt{D_0 t^\mu}$. Обаче, сега ние трябва да решим (23) при $\beta \neq 0$.

4.1.1. Дробен модел с производна на Riemann-Liouville

С използване на производната на Riemann-Liouville, уравнение (22) може да се представи в следния вид

$$\frac{d}{dt} \delta^2 = {}_{RL}D_t^{1-\mu} (D_0 e^{-\beta t} N) \quad (24)$$

Тук експоненциалната функция $e^{-\beta t}$ може да се представи като безкраен ред чрез функцията на Mittag-Leffler [13]

$$e^{-\beta t} = E_{1,1}(\beta t) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(\beta t)^i}{\Gamma(i+1)} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\beta^i t^i}{\Gamma(i+1)} \quad (25)$$

За $\beta < 0$ имаме $e^{-\beta t}$ и тогава следвайки (63)

получаваме $e^{-\beta t} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-1)^i \beta^i t^i}{\Gamma(i+1)}$. Следователно,

дясната страна на (25) е

$${}_{RL}D_t^{1-\mu} e^{-\beta t} = {}_{RL}D_t^{1-\mu} \left[\sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-1)^i \beta^i t^i}{\Gamma(i+1)} \right] \quad (25)$$

Прилагайки дробно интегриране получаваме

$$\frac{d}{dt} \delta^2 = (D_0 N) \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-1)^i}{\Gamma(i+\mu)} \beta^i t^{i+\mu-1} \quad (26)$$

Тогава, от интегрирането на (26) резултатът е

$${}_{RL}\delta_\mu = \sqrt{D_0 t^\mu} \sqrt{N} \left[\frac{1}{\Gamma(1+\mu)} - \sum_{i=1}^{\infty} \frac{(-1)^i (\beta t)^i}{\Gamma(i+\mu+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (27)$$

4.1.2. Дробен модели с производна на Caputo

Решението а дълбочината на проникване практически същото като това получено с производната на Riemann-Liouville. е

$${}_C\delta_\mu = \sqrt{\frac{D_0}{\beta}} \sqrt{\left[\sum_{i=1}^{\infty} \frac{(-1)^i (\beta^{i+1})}{\Gamma(i+\mu+1)} t^{i+\mu} \right]} \sqrt{(n+1)(n+2)} \quad (28)$$

4.1.3. Дробен модели с оператор (производна) на Caputo-Fabrizio

Сера, използвайки производната на Caputo-Fabrizio в дифузионния модел на Додсън, уравнението относно $\delta(t)$ е

$$D_t^\alpha \delta^2 = D_0 e^{-\beta t} N \quad (29)$$

$$\delta(t) = \sqrt{\frac{D_0}{\beta}} \sqrt{N} \sqrt{(1 - e^{-\beta t})} \left[\alpha + (1-\alpha) \frac{\beta}{e^{-\beta t} - 1} \right] \quad (30)$$

Отношението $\delta(t)/\delta(t)_{\alpha=1}$ е мярка за отклонението на дълбочината на дифузионния слой от случая за $\alpha = 1$. В този случай имаме

$$\frac{{}_{CF}\delta_\alpha(t)}{\delta(t)_{\alpha=1}} = \sqrt{\alpha - (1-\alpha) \frac{\beta}{1 - e^{-\beta t}}} \quad (31)$$

За $\alpha = 1$ веднага получаваме, че $\delta(t)/\delta(t)_{\alpha=1} = 1$.

Отношението (31) за големи времена се апроксимира като

$$\left. \frac{{}_{CF}\delta_{\alpha}(t)}{\delta(t)_{\alpha=1}} \right|_{\beta t \ll 1} \approx \sqrt{\alpha} \quad (32)$$

Следователно, физически, намаляването на стойността на α редуцира дълбочината на дифузионния слой и дифузионният процес спира по-бързо, в сравнение със случаите с по-големи стойности на α . Тогава, дистанцията от повърхността $x=0$, където дифузанта спира да прониква в средата, зависи от дробния порядък α .

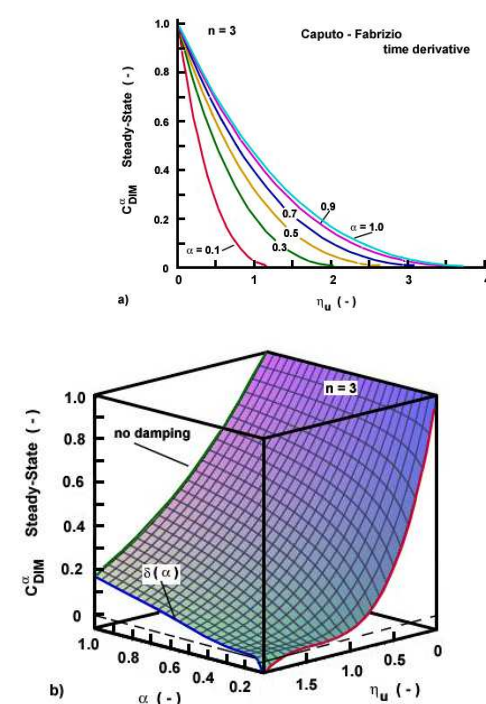
За големи времена, Когато $\beta \ll \alpha \in [0,1]$ стационарният профил се апроксимира като

$$C^{\alpha}(x, \infty)_{DIM} \approx \left(1 - \frac{x}{\sqrt{\frac{D_0}{\beta}} \sqrt{(n+1)(n+2)} \sqrt{\alpha}} \right)^n \quad (36)$$

Крайната концентрационен профил $C^{\alpha}(x, \infty)_{DIM}$ е представен на Фиг.1 за $n=3$. Двумерните профили (Фиг.1а) ясно показват демпфиращия ефект на дробния параметър α . По-общ поглед върху решението може да се направи чрез тримерното представяне на Фиг.1б, където фронтовата линия $\delta(\alpha)$ е ясно изразена. Очевидно е, че за $\alpha=0.1$ профилът бързо достига до нула, докато за същото време (същата стойност на автомоделната променлива η_u), профилът за $\alpha=1$ (отсъстват демпфиращ ефекти) достига едва 0.2 от повърхностната концентрация (при $x=0$).

В този момент, ние трябва да отбележим, че същият задържащ ефект на дробния порядък

μ се наблюдава и при изчезваща памет моделирана със сингулярно ядро, където дълбочината на проникване се мащабира като ${}_{RL}\delta_{\mu} = \sqrt{D_0 t^{\mu}} \sqrt{N/\Gamma(1+\mu)}$. От тази гледна точка, решението чрез оператора на Caputo-Fabrizio дава очакваното адекватно физическо поведение, т.е. задържащия (демпфиращ) ефект е явно изразен чрез дробния параметър α .



Фиг.1. Стационарни профили на концентрацията :а) Двумерни разпределения (профили) ; б) Тримерен профил ;

5. ИЗВОДИ

Това изследване разглежда приближени интегрални решения на нелинейното дифузионно уравнение на Додсън, както от цял порядък, така и на формално фракционализирани версии. Като добър пример от това изследване, е фактът, че е възможно решение чрез автомоделна променлива

(similarity solution) след начална нелинейна трансформация.

Всъщност, това са първите получени до сега решения, при които временната еволюция на фронта на дифузия може явно да се изрази.

Като междинен резултат, свързан с получените решения, беше показано как дробната по време производна на Caputo-Fabrizio работи с експоненциална функция $\exp(\pm \beta t)$.

Сравнителният анализ ясно показва, че използването на производната на Caputo-Fabrizio позволява да се получи формално фракционализиран модел и прилагайки метода на интегралния баланс директно да се генерира не-Болцманова автомоделна променлива инкорпорираща дифузионния коефициент и скоростната константа (реципрочна на дефинираното релаксационно време τ).

Аналогични резултати, получени с дробни производни използващи сингулярни ядра (Riemann-Liouville или Caputo), също инкорпорират демпфиращ ефект чрез дробния порядък, но в тези случаи възникват два основни проблема: 1) Решението за фронта на дифузия съдържа безкраен ред, което затруднява дефинирането на автомоделна променлива, и 2) Зависимостта между дробния порядък μ и физически дефинираното релаксационно време τ не може явно да бъде установена. Това са проблеми, които биха могли да бъдат решени в други изследвания, извън рамките на тази глава, но за този момент, физически адекватното решение възниква, когато формалната фракционализация на уравнението на Додсън използва оператора на Caputo-Fabrizio.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Dodson, M.H., Closure temperature in cooling geochronological and petrological systems, *Cont. Mineral., and Petrol.*, 40 (1973),3, pp. 259-274.
- [2] Dodson, M.H., Theory of cooling ages, In : *Lectures in Isotope Geology*, E. Jaeger and J.C.Hunziker, Springer, Berlinn Heidelberg, 1979, pp. 194-202.
- [3] Ganguly, J., Tirone, M., Diffusion closure temperature and age of a mineral with arbitrary extent of diffusion: theoretical formulation and applications, *Earth. Plant Sci. Lett.*, 170 (1999), 1-2, pp.131-140.
- [4] Zang, Y. Diffusion in mineral and melts: Theoretical background, *Rev. Min. and Geochem.*, 72 (2010), 1, 5-59.
- [5] Krasilnikov, V.V., Savotchenko, S.E., Models of nonstationary diffusion over nonequilibrium grain boundaries in nanostructured materials, *Technical Physics*, 60(2015),7, pp.1031-1038
- [6] Nazarov, A.A., Grain-boundary diffusion in nanocrystals with time-dependent diffusion coefficient, *Physics of Solid State*, 45 (2003), 6, pp. 1166-1169.
- [7] Mitchell S L, Myers T G Application of standard and refined heat balance integral methods to one-dimensional Stefan problems, *SIAM Review* 52(2010), pp.57–86.
- [8] Mitchell, S.L., Myers, T.G., Application of heat balance integral methods to one-dimensional phase change problems, *Int. J. Diff. Eqs.*, volume 2012, Article ID 187902, doi: 10.1155/2012/187902.
- [9] Podlubny, I, *Fractional Differential Equations*, Academic Press, New York, 1999.

ГЛАВА 4.2

ВЪЗНИКВАЩИ ПРОБЛЕМИ ПРИ МОДЕЛИРАНЕТО НА ПЪРВА ЗАДАЧА НА СТОКС ЗА ФЛУИД НА CASSON:

Изследване на модели с цял и дробен порядък чрез интегрален метод¹

Флуидите на Casson са ненютониви среди с остатъчно (прагово) напрежение на срязване. Концентрираните циментови суспензии и човешката кръв демонстрират такива свойства поради формирането на верижни образувания от частици суспендирани в непрекъснатата фаза. Първата задача на Стокс е изследвана в случай на модели от цял и дробен порядък с използване на различни видове дробни (по време) производни. Приближените решения са получени чрез интегрален метод и параболичен апроксимиращ профил с недефинирана експонента. Този подход позволява за се получи физически ясно решение с добре дефинирани автомоделни променливи, отчитащи както Нютоновите така и Ненютоновите ефекти на нестационарното решение. Дискутиран е проблемът с коректната фракционализация на моделните уравнения.

1. ВЪВЕДЕНИЕ

Флуидите на Casson са ненютониви среди демонстриращи остатъчно (прагово) напрежение на срязване [1,2]. Концентрираните циментови суспензии и човешката кръв демонстрират такива свойства, поради формирането на верижни образувания от частици суспендирани в непрекъснатата фаза. [1,2]. Причината да се напише това изследване е експлозията на статии посветени на нестационарни течения на флуид на Casson с модели от цял порядък [3-10], дробни

производни със сингулярни [11] и несингулярни памети [12]. Изследвана е класическата първа задача на Стокс чрез метода на интегралния баланс

1.1. Основни реологични модели на течности с прагово напрежение на срязване

Флуидите на Casson принадлежат към фамилията на среди демонстриращи *вискозопластично* (viscoplastic) поведение [1,2]. Това поведение се характеризира с прагово напрежение на срязване (yield stress) τ_0 , което приложените тангенциални напрежения трябва да преодолеят, с цел да се постигне деформация или течение [1]. Ако срязващите напрежения са по-малки от τ_0 , материалите се деформират само еластично или текат по формата на бутало (bulk flow behaviour).

Съществуват три основни модела за реологичното поведение на *вискозопластични материали* (течности), а именно:

- Течност с линейна крива на течение, когато $|\tau_{yx}| > |\tau_0|$, се нарича Бингамова пластична течност (*Bingham plastic fluid*) с конститутивно уравнение, свързващо напрежението и скоростта на деформация чрез зависимостта (реограма) [1,2], съответстващо на едномерно стационарно течение (one-dimensional steady shearing flow), а по-точно

$$\tau_{yx} = \tau_0^B + \mu_B (\dot{\gamma}_{yx}), \text{ for } |\tau_{yx}| > |\tau_0^B|$$

- Това е модел с два параметъра, а именно

$$\left(|\tau_{yx}|\right)^{\frac{1}{2}} = \left(|\tau_0^C|\right)^{\frac{1}{2}} + \mu_C \left(|\dot{\gamma}_{yx}|\right)^{\frac{1}{2}} \text{ for } |\tau_{yx}| > |\tau_0^C| \quad (3)$$

$$\dot{\gamma}_{yx} = 0, \text{ for } |\tau_{yx}| < |\tau_0^C|$$

¹ Публикувано като: **Hristov J.**, Emerging issues in the Stokes' first problem for a Casson fluid: from integer to fractional models by integral-balance approach, *Journal of Computational Complexity and Applications*, 3 (2) (2017) 72-86; <http://118.193.234.168/aspcms/news/2016-12-25/108.html>

1.2. Разглеждани проблеми в тази глава

Тази глава се фокусира върху основните проблеми възникващи при моделиране на нестационарно ненютоново течение с инкорпирани ефекти на затихваща памет, посредством дробни (по време) производни. Като илюстративен пример е решена първата задача на Стокс. Временната еволюция на дълбочината на проникване (от повърхността, където се прилага сръзващото напрежение до „междофазната повърхност“ разделяща течащия флуид (sheared fluid) и ядрото движещо се като бутало (the bulk core) е изследвана в два случая:

- използване на производни от цял порядък и дробни (по време) производни (с ефект на памет отчитащ релаксацията).
- Използването на дробни (по време) производни е принципен проблем при конструиране на моделните уравнения и два основни подхода са дискутирани по-нататък:
 - Формална фракционализация (formalistic fractionalization) и
 - Фракционализация използваща конститутивни уравнения *поток-градиент* (flux-gradient).

2. ИЗВОДИ

Представени са два принципно различни подхода:

- *Формална фракционализация*

Дефиниране на конститутивни уравнения с релаксационна функция в смисъл на Cattaneo

Резултатите от тези два подхода са модели, които включват ретардиращи ефекти и всички от тях се редуцират до добре познатия модел от цял порядък. Независимо от това общо качество, моделите получени чрез формална фракционализация са по-лесни за решение, в

сравнение с тези получени чрез конститутивни уравнения.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] R.R. Huilgol, *Fluid mechanics of Viscoplasticity*, Springer, Berlin Heidelberg, 2015.
- [2] R. P. Chhabra, J.F. Richardson, *Non-Newtonian Flow in the Process Industries*, 1st edition, Butterworth-Heinemann, Oxford, UK, 1999.
- [3] S. Mukhopadhyay, K. Vajravelu, R. A. Van Gorder, Casson Fluid Flow and Heat Transfer at an Exponentially Stretching , Permeable Surface, *Journal of Applied Mechanics*, 80: 054502-1; DOI: 10.1115/1.4023618, September 2013.
- [4] S. Mukhopadhyay, Casson fluid flow and heat transfer over a nonlinearly stretching surface, *Chin. Phys. B*, 22 (7): 074701, July, 2013, DOI: 10.1088/1674-1056/22/7/074701
- [5] U. Khan, S.I. Khan, N. Ahmed , Saima Bano, S. T.Mohyud-Din, Heat transfer analysis for squeezing flow of a Casson fluid between parallel plates, *Ain Shams Engineering Journal* , 7(1):497–504; January, 2016; DOI: /10.1016/j.asej.2015.02.009
- [6] A. Subba Rao,V. R. Prasad, N. B.Reddy, O. A.Beg, Heat transfer in a Casson rheological fluid from a semi-infinite vertical plate with partial slip, *Heat Transfer—Asian Research*, 44 (2), , February, 2015, DOI: 10.1002/htj.21115
- [7] T. Poornima,P. Sreenivasulu, N. Bhaskar Reddy, Slip Flow of Casson Rheological Fluid Under Variable Thermal Conductivity with Radiation Effects, *Heat Transfer—Asian Research*, 44 (8): 718–737,
- [8] Mustafa M, Hayat T, Pop I, Aziz A. Unsteady boundary layer flow of a Casson fluid due to an impulsively started moving flat plate. *Heat Transf Asian Res*, 2011;40 (6):563–576, September,2011.
- [9] E.M.Arthur, I.Y. Seini, L.B.Bortteir, Analysis of Casson Fluid Flow over a Vertical Porous Surface with Chemical Reaction in the Presence of Magnetic Field, *J. App. Math. Phys*, 3 (3): 713-723, 2015,
- [10] A.M.Siddiqui, A.A. Farooq, M.A.Rana, A Mathematical Model for the Flow of a Casson Fluid due to Metachronal Beating of Cilia in a Tube, *The Scientific World Journal* ,2015: Article ID 487819, DOI: 10.1155/2015/487819

ГЛАВА 4.3

ПЪРВА ЗАДАЧА НА СТОКС ЗА НЕНЬУТОНОВ ФЛУИД МОДЕЛИРАН СЪС СМЕСЕНИ¹ ПРОИЗВОДНИ: Подобен интегрален подход

Изследвано е нестационарно течение на неньютонов флуид (second grade fluid), моделирано чрез смесени производни (3 порядък) по време и пространство, предизвикано от внезапна смяна на граничното условие (първа задача на Стокс). Използван е подобен интегрален подход с техника на двойно интегриране. Разгледани са две версии на смесени производни по време и пространство: локални производни (от цял порядък) и дробни по време производни (нелокални) на Riemann-Liouville. Решението използва концепцията за крайна дълбочина на проникване на дифузията във флуида импулс, от повърхността в обема на флуида. Решенията дават директна възможност да се определи функционалната зависимост на дълбочината на проникване, която е контролирана от две автомоделни (безизмерни) променливи: $\eta = \gamma/vt$ свързана с неньутоновото поведение на флуида и числото на Deborah number $De^\gamma = \beta_1/vt^\gamma$, свързано еластичното му поведение.

1. ВЪВЕДЕНИЕ

Флуидите от втори порядък са често срещани вискозоеластични флуиди с индустриално приложение като полимерни разтвори [7], емулсии [8], суров нефт [9], флуиди използвани в процеси с екструзия [10-12], кръв [13-15]. Също така, вискозоеластичното поведение често се демонстрира от много важни промишлени течности, като материали

използвани за покрития, свързващи лепила, смазващи греси, течности използвани за сондиране, полимери за напълване на обемни структури и т.н.

Тази глава представя приближени решения, използващи метода на интегралния баланс, на нестационарно течение на вискозоеластична течност (second grade fluid) с гранични условия без хлъзгане (non-slip boundary condition). По-точно ние разглеждаме първата задача на Стокс, когато моделно уравнение е параболично по природа, но съдържа смесена производна по време и пространство. Ние разглеждаме два случая на смесени производни по време и пространство: производна (локална) от цял порядък (от 3 порядък) и дробна по време производна (нелокална) на Riemann-Liouville.

2. ФОРМУЛИРАНЕ НА ПРОБЛЕМА

2.1. Първа задача на Стокс

Най-често, конститутивното уравнение за вискозоеластична течност от втори порядък се представя в две форми

$$\tau(t) = \mu \varepsilon(t) + \alpha_1 D_t^\gamma [\varepsilon(t)] \quad (6)$$

$$\tau(t) = \mu \varepsilon(t) + E \frac{d\varepsilon(t)}{dt} \quad (7)$$

Освен това, $T_{xx} = T_{yy} = T_{zz} = T_{xz} = T_{yz} = 0$, където

$$T_{xy} = T_{yx}.$$

В полубезкрайно пространство запълнено с вискозоеластичен флуид, който се привежда в движение чрез поставена на повърхността безкрайна пластина, внезапно приведена в движение с постоянна скорост U_0 (успоредна на оста x), конститутивното уравнение (7), както и

¹ Публикувано като: [The Stokes first problem of a second grade fluid modelled by a mixed time-space derivative: An improved integral-balance approach](#), In: *“Mathematical Methods in Engineering - Theory”*, edited by Kenan Taş, Dumitru Baleanu and J.A.T. Machado, and will be published by Springer in 2018

втората версия на уравнение (2) се представят във вида

$$\mathbf{T}_{xy} = \mu \frac{\partial u}{\partial y} + \alpha_1 D_t^\gamma \frac{\partial u}{\partial y} \quad (8)$$

Коефициентът α_1 е първият нормален модул на напреженията, а операторът на Riemann-Liouville ${}_{RL}D_t^\gamma$ означава, че това е модел на *обобщена течност от втори ред* (а *general second grade fluid*). Операторът ${}_{RL}D_t^\gamma$ има дробна по време дименсия $[\rho y^2/\mu]^\gamma$. Тогава, α_1 в уравнение (8) (виж у-ние 6, също) е равно на вискозоеластичния коефициент E (виж уравнение 6), с уточняваща константа C , т.е. $\alpha_1 = E/C$, където $C = [\rho y^2/\mu]^{\gamma-1}$. Следователно, уравнението на движение, представено чрез смесена (по време-пространство) производна от дробен порядък е

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} = \mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \alpha_1 D_t^\gamma \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad (9)$$

Граничните и начални условия свързани с първата задача на Стокс са

$$\begin{aligned} u(y, 0) &= 0, \quad y > 0; \quad u(0, t) = U_0, \quad t > 0; \\ u &\rightarrow 0, \quad y \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (10)$$

Освен това, $\nu = \mu/\rho$ е кинематичния вискозитет на флуида $[m^2/s]$; $\beta_1 = \alpha_1/\rho [m^2]$

Алтернативно, моделното уравнение от цял порядък, за движението на флуид от втори порядък е

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \beta_1 \frac{\partial^3 u}{\partial t \partial y^2} \quad (11)$$

Освен нова, $\beta_2 = E/\rho [m^2]$ често се представя като $\beta_2 = \nu \lambda_r$, където λ_r е релаксационно време $[s]$.

3. РЕШЕНИЯ

3.1. Решения чрез DIM

3.1.1. Модел от цял порядък със смесена производна по време и пространство

Прилагайки технологията на DIM към уравнение (11) получаваме

$$\frac{d}{dt} \int_0^\delta \int_y^\delta \left[u(y, t) - \beta_1 \frac{\partial^2 u(y, t)}{\partial y^2} \right] dy dy = \nu u(0, t) \quad (12)$$

С апроксимация профил $u_a(y, t) = U_0 (1 - x/\delta)^n$ дълбочината на проникване е

$$\delta_{DIM(\gamma=1)} = \sqrt{\nu t} \sqrt{(n+1)(n+2)} \sqrt{\left(1 + \frac{\beta_1}{\nu t}\right)} \quad (13)$$

Отношението $\beta_1/\nu t$ дефинира числото на Deborah, $De = \lambda_r/t$: отношението на релаксационното време $\lambda_r = \beta_1/\nu$ към времето за наблюдение t . Изразът (13) показва, че с нарастване на времето за наблюдение, отношението $\beta_1/\nu t$ става пренебрежимо малко, т.е. за големи времена ние получаваме $\delta_{\beta_1=0} = \sqrt{\nu t} \sqrt{(n+1)(n+2)}$.

3.1.2. Дробно-диференциален модел със смесена производна по време и пространство

С подхода на DIM, получаваме

$$\frac{d}{dt} \int_0^\delta \int_y^\delta u dy dy = \nu u(0, t) + \int_0^\delta \int_y^\delta \left(\beta_2 D_t^\gamma \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) dy dy \quad (14)$$

С приближения профил $\tilde{u}_a = u_a/U_0 = (1-x/\delta)^n$

получаваме

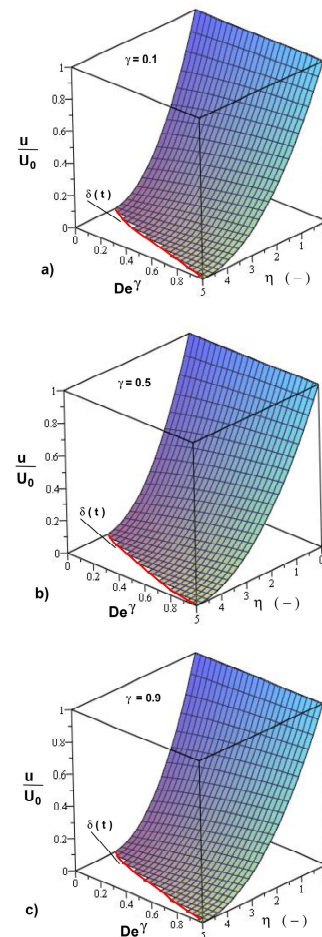
$$\delta_{DIM(\gamma \neq 1)} = \sqrt{vt} \sqrt{(n+1)(n+2) \left[1 + \left(\frac{\beta_2}{vt^\gamma} \right) \frac{1}{\Gamma(2-\gamma)} \right]} \quad (15)$$

3.2. Число на Deborah

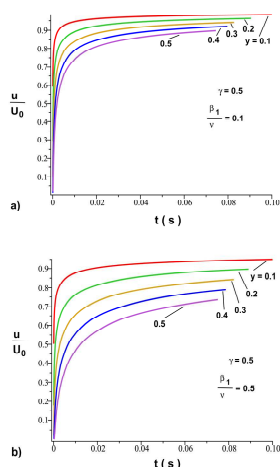
Отношенията β_1/vt^γ и β_2/vt възникват естествено в изразите за дълбочината на проникване, то на числото на еластичност е $El = \alpha_1/(L^2/\nu)$, където L^2/ν е дифузионен (Нютонов) макроскопски мащаб за време. Дефинирайки мащаб за дължина $L = l_\gamma = \sqrt{vt^\gamma}$, то можем да запишем, че $El = \alpha_1/t^\gamma$. В този смисъл, $De^\gamma = \beta_1/vt^\gamma = (\sqrt{\beta_1}/\sqrt{vt^\gamma})^2 = L_{\beta_1}/l_\gamma$, където $L_{\beta_1} = \sqrt{\beta_1}$. Тогава, отношението на мащабите за дължина е $L_{\beta_1}/l_\gamma = De$. Това отношение може да се разглежда като относителна дълбочината на проникване на импулса, приложен на границата, и транспортиран в обема на флуида чрез два механизма: *вискозен пренос* (l_γ) и *еластичен пренос* (L_{β_1}). Следователно, скоростният профил е функция на две безизмерни (автомоделни) променливи $\eta = y/\sqrt{vt}$ и $\chi = \sqrt{\beta_1}/\sqrt{vt^\gamma} = \sqrt{De^\gamma}$. Първата безизмерна променлива съответствува на нютоново течение, докато втората променлива е свързана с еластичната компонента на преноса на импулс ($\chi^2 = De^\gamma$)

4. ЧИСЛЕНИ ЕКСПЕРИМЕНТИ С ПРИБЛИЖЕНИТЕ РЕШЕНИЯ

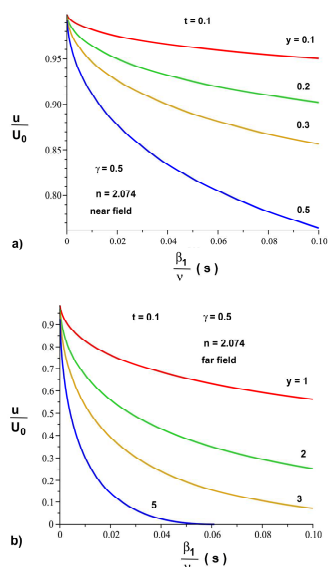
Графиките на Фиг.1 показват как с нарастване на $De = \chi^2$, профилът $u/U_0 = f(\eta, \chi = const.)$ се стреми към почти линейна зависимост. Вариациите на η и β_1/ν , за малки и големи времена, и ефекта върху скоростните профили са показани на Фиг..2a,b.



Фиг. 1. 3D приближени профили за малки числа на Deborah е различни стойности на дробния параметър, като функция на безизмерните променливи



Фиг. 3. Скоростни профили като функция на времето (малки времена) за фиксирани дистанции y от пластината ($y=0$) представени чрез приближеното решение за $n = 2.074$ и $\gamma = 0.5$



Фиг. 4. Скоростни профили за $n = 2.074$ и $\gamma = 0.5$. Ефект на нарастващото отношение β_1/v върху скоростното поле в две зони на обема на флуида (дистанции измерени от пластината ($y = 0$))

ЛИТЕРАТУРА

[1] Naraim, A., Joseph, D.D., Remarks about the interpretations of impulsive experiments in shear flows of viscoplastic liquids, *Rheologica Acta*, 22 (1983), 6, 528{538

[2] Labi, N. Benkah, Y.K., Boutra, A., Brunier, E., Simultaneous hydrodynamic and thermal flow development of a thermodependent viscoplastic fluid, *Int. Rev. Chem. Eng.* 2 (2010), 1, 31{39.

[3] Tan, W., Xu, M., The impulsive motion of a plate in a generalized second grade fluid, *Mech. Res. Com.* 29 (2002), 1, 3{9.

[4] Tan, W., Xu, M., Plane surface suddenly set in motion in a viscoelastic fluid with fractional Maxwell model, *Acta Mech. Sin.*, 18 (2002), 4, 342{349.

[5] Jordan, P.M., A note on start-up, plane Couette flow involving second-grade fluids, *Mathematical Problems in Engineering*, 2005 (2005), 5, 539{545.

[6] Momoniat, E., A point source solution for unidirectional flow of a viscoelastic fluid, *Physics Letters A*, 372 (2008), 22, 4041{4044.

[7] Bandelli, R., Rajagopal, K. R., Start-up flows of second grade fluids in domains with one finite dimension, *Int. J. Non-Linear Mechanics*, 30 (1995), 6, 817{839.

[8] Derkach, S.R., Rheology on the Way from Dilute to Concentrated Emulsions, *Int. Rev. Chem. Eng.*, (2009), 3, 465{472.

[9] Siginer, D.A., Letelier, M.F., Laminar flow of non-linear viscoelastic fluids in straight tubes of arbitrary contour, *Int J Heat Mass Trans*, 54 (2011), 9-10, pp.2188-2202.

[10] Pirkle Jr., J.C., Braatz, R.D. Instabilities and multiplicities in non-isothermal blown film extrusion including the effects of crystallization, *J Proc Cont*, 21 (2011), 3, pp.405-414.

[11] Hsiao, K.L., Manufacturing Extrusion Process for Forced Convection Micropolar Fluids Flow with Magnetic Effect over a Stretching Sheet, *Int. Rev. Chem. Eng.*, 1 (2009), 3, pp. 272-276.

[12] Hsiao, K.L., Manufacturing Extrusion Process for Magnetic Mixed Convection of an Incompressible Viscoelastic Fluid over a Stretching Sheet, *Int. Rev. Chem. Eng.*, 1 (2009), 2, pp. 164-169.

[13] Thurston, G.B., Viscoelasticity of Human Blood, *Biophysical J.*, 12 (1972), 9, pp. 1205-1217.

[14] Karimi S., Dabir, B., Dadvar, M., Non-Newtonian Effect of Blood in Physiologically Realistic Pulsatile Flow, *Int. Rev. Chem. Eng.*, 2 (2009), 7, pp. 805-810.

[15] Schmitt, C., Henni, A.H., Cloutier, G., Characterization of blood clot viscoelasticity by dynamic ultrasound elastography and modeling of the rheological behavior, *J. Biomech.*, 44 (2011), 4, pp. 622-629.

ГЛАВА 4.4

РАДИАЦИОННО-ДИФУЗИОНЕН МОДЕЛ:

Интегрален подход¹

Получени са явни приближени решения, в затворена форма, на радиационното дифузионно уравнение чрез прилагане на метод на интегралния баланс с двойно интегриране. Решени са проблеми свързани със скок в повърхностната температура и променящи се във времето гранични условия. Експонентата на апроксимацията профил и грешката на апроксимацията се определят директно чрез минимизация на остатъчната функция на моделното уравнение.

1. ВЪВЕДЕНИЕ

Поведението на топлинната вълна при термална дифузия, в резултат на радиационен механизъм на пренос, е резонна физическа и математическа интерпретация на преноса на енергия в различни ситуации свързани с астрофизиката [1], физика на плазмата [2,3], изолация на сгради [4], и т.н. Преди всичко, този физичен модел приема дифузионна апроксимация свързваща локалния топлинен поток в средата с локалния градиент от плътността на радиационната енергия, един подход познат от класическото уравнение на Фурие. Следвайки Smith [5], едномерното уравнение за радиационен пренос, в отсъствие на движение на флуиди, е

$$\rho \frac{\partial e}{\partial t} = -\frac{\partial \Phi}{\partial x}, \quad \Phi = -\frac{4}{3K\rho} \frac{\partial \sigma T^4}{\partial x} \quad (1)$$

Представяне на плътността на потока Φ чрез градиента на четвърта степен от локалната температура е съгласно апроксимацията на

Rosseland, която е валидна за оптически дебели [1,5,6], непроницаеми среди [5,6,7,8, 9].

Целта на това изследване е да представи едно приближено, и явно, аналитично решение, в затворена форма, позволяващо да се определи дълбочинната на проникване на топлинната вълна и пространствения профил, чрез използване на интегрален подход (Глава 1.2 и Глава 1.3) [12,13], успешно прилаган за решаване на задачи свързани с нелинейна топлопроводност.

2. НЕЛИНЕЕН РАДИАЦИОННО-ДИФУЗИОНЕН МОДЕЛ

Вътрешната енергия e на средата и усреднената проницаемост на Rosseland (Rosseland mean opacity) K се апроксимират чрез степенни зависимости, свързващи температурата T и плътността на материала ρ , а именно [5]

$$e = f \frac{T^\beta}{\rho^\mu}, \quad \frac{1}{K} = g \frac{T^\alpha}{\rho^\lambda} \quad (2a,b)$$

където $f = 3.4 \text{ MJ/kg}$ и $g = 1/7200 \text{ g/cm}^2$ са размерни константи (специално за случая на злато) [14].

Експонентите α and β са положителни константи и съгласно [5] и [14] имаме: $\alpha = 1.5$ и $\beta = 1.6$. Със степенните зависимости (2a,b) балансът на енергия (1) води до следното дифузионно уравнение

$$\frac{\partial T^\beta}{\partial t} = D \frac{\partial^2 T^{4+\alpha}}{\partial x^2}, \quad D = \frac{16\varepsilon}{\beta} \frac{g\sigma}{3f\rho^{2-\mu+\lambda}}, \quad \varepsilon = \frac{\beta}{4+\alpha} \quad (3)$$

Важно е да се отбележи, че дифузионният коефициент D в (3) има

¹ Публикувано като: Hristov, J. The heat radiation diffusion equation: Explicit analytical solutions by improved integral-balance method, *Thermal Science*, (2017), in press; DOI: [10.2298/TSCI171011308H](https://doi.org/10.2298/TSCI171011308H)

размерност $D \equiv [m^2/sK^{4+\alpha-\beta}]$ и само когато $\alpha = 0$ и $\beta = 1$ получаваме $D \equiv [m^2/sK^3]$.

3. СТРАТЕГИЯ НА РЕШЕНИЕТО

С трансформация $\theta = T^\beta$ получаваме [5]

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \theta^w}{\partial x^2}, \quad w = \frac{4+\alpha}{\beta} \quad (4)$$

От декларираните по-рано стойности на α и β следва, че $w > 1$. Тогава, получаваме [12]

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_w \theta^m \frac{\partial \theta}{\partial x} \right], \quad \theta^m \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{1}{m+1} \frac{\partial \theta^{m+1}}{\partial x} \quad (5)$$

където $D_w = wD$ и $m = w-1 > 0$

4. РЕШЕНИЯ ЧРЕЗ DIM: случаи на постоянна плътност на средата

4.1. Стъпково изменение на температурата на границата

За гранично условие на Дирихле $T_s = const.$ имаме $\theta_s = \theta(0, t) = T_s^\beta = const.$ Решението чрез DIM използва апроксимиращ параболичен профил $\theta = \theta_s (1 - x/\delta)^n$. Прилагайки DIM, нормализираният апроксимиращ профил (решение) в термини на T е

$$T_{norm} = \frac{T}{T_s} = \left(1 - \frac{x}{\sqrt{D_w t} \sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{m+1}}} \right)^{\frac{n}{\beta}} \quad (6)$$

Както беше установено в [12] (Глава 1.2), експонентата n следва правилото $n = 1/m$ и следователно, профилът (6) има експонента $1/m\beta$. Като следствие от това, за $m = w-1 = 4-1 = 3$, и $\beta = 1.6$ получаваме

$$1/m\beta \approx 0.208. \quad \text{За} \quad \eta_D = x/\sqrt{D_w t} = 0.440$$

получаваме $T_{norm} = 0$ и тази точка дефинира фронта на топлинната вълна

4.2. Експоненциално (зависещо от времето) гранично условие (задача на Marshak)

Следвайки Marshak [9] моделното уравнение (в оригинални променливи) е

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{D_M}{(p+4)} \frac{\partial^2 T^{4+p}}{\partial x^2}, \quad D_M = \frac{4cl_0}{3} \quad (7)$$

Marshak [9] разглежда зависещо от времето гранично условие: $T_s = J_0 \exp(2\alpha_s t)$, $x = 0$, където J_0 е началната повърхностна температура.

С апроксимиращ профил $T_a = T_s (1 - x/\delta)^n$ и $T_s = T_s(t)$, получаваме

$$\frac{T_a(x, t)}{J_0 e^{2\alpha_s t}} = \left(1 - \frac{\eta_M}{\sqrt{N(n, p)/2}} \right)^n \quad (9)$$

$$\eta_M = \frac{x}{\sqrt{\frac{D_M}{\alpha_s} J_0^{3+p} e^{2\alpha_s t(3+p)}}} \quad 1 \quad (10)$$

Следвайки техниката използвана в [12,13] (Глава 1.2 и Глава 1.3), получаваме $n_{opt} \approx 0.153$. игрешка по-малка от 0.02, както е показано на Фиг.1b. (виж също решенията в Част 1).

4.3. Степенно (зависещо от времето) гранично условие (задача на Garnier)

Garnier et al. [8] разглежда същата постановка на проблема и чрез смяна на променливите

$\xi = T^{4+\alpha}$, трансформира уравнение (1) в

$$\frac{\partial \xi^\varepsilon}{\partial t} = D_G \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2}, D_G = \frac{16}{12+3\alpha} \frac{g\sigma}{\rho_0^{2-\mu+\lambda}}, \varepsilon = \frac{\beta}{4+\alpha} \quad (36)$$

ако мащабиращите зависимости (2) са в сила с $\alpha=1.5$, $\beta=1.6$, $\lambda=0.2$ и $\mu=0.14$.

Смяна на променливата $\theta = \xi^\varepsilon = T^{4+\alpha}$

трансформира уравнение (36) във вида

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = D_G \frac{\partial^2 \theta^w}{\partial x^2}, w = \frac{4+\alpha}{\beta} = \frac{1}{\varepsilon} \quad (38)$$

което е еквивалентно на уравнение (14)

С приетия апроксимиращ профил $\theta = \theta_s (1-x/\delta)^n$ и интегралното съотношение на DIM (15) получаваме

$$\delta^2 = D_G \frac{N(n, w)}{kw+1} \frac{T_{s0}^{w-1}}{a_{ts}} t^{k(w-1)+1}$$

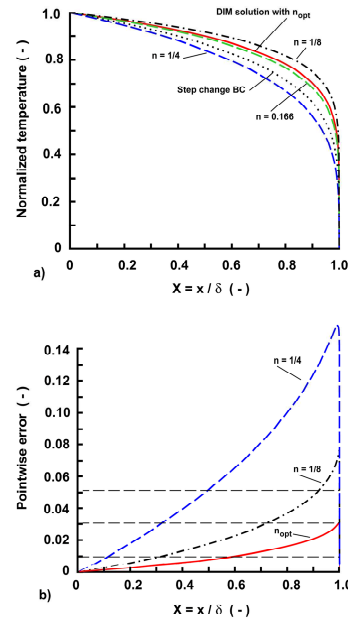
$$N(n, w) = \frac{(n+1)(n+2)}{w}, \left(t_s\right)^{kw-1} = a_{ts} = \text{const.} \quad (39)$$

Следователно, дълбочината на проникване, в термини на $T(x, t)$, е

$$\delta_H = \sqrt{D_G T_{s0}^{(w-1)} t^{n_H}} \sqrt{\frac{N(n, w)}{a_{ts}}} \quad (40)$$

$$n_H = k \frac{4+\alpha-\beta}{\beta} + 1 = k(w-1) + 1 \quad (41)$$

Решението чрез DIM води до закон за разпространение на фронта $\delta \equiv t^{n_H/2}$ и съотношението $(n_H - 1) = (n_G - 1)/\beta$. Със стойности на мащабиращите експоненти $\alpha=1.5$ и $\beta=1.6$ ние получаваме $\delta_H \equiv t^{1/2+1.218k}$, докато $\delta_G \equiv t^{1/2+1.95k}$. За $k=0$, както δ_H така и δ_G се изменят по закона $\sqrt{t}$. По-нататък, чрез обратната трансформация $T = \theta^{1/(4+\alpha)}$ получаваме



Фиг. 1. Сравнение на решението получено чрез DIM с решението на Marshak. а) Нормализирани температурни профили; б) Абсолютна грешка на апроксимация $|Y_{\text{Marshak}} - Y_{\text{DIM}}|$, където Y означава нормализираната температура (виж уравнение (27) и уравнение (34)). **Бележка:** Прекъснатата линия представя решението чрез DIM от пример 4.1, със скок в повърхностната температура. Горизонталните пунктири маркират три нива на абсолютната грешка: 0.01, 0.03 и 0.05. приближеното решение $T_a(x, t)$

$$T_a(x, t) = T_{s0} \left(\frac{t}{t_s} \right)^k \left(1 - \frac{x}{\delta_H} \right)^q, q = \frac{n}{4+\alpha} \quad (42)$$

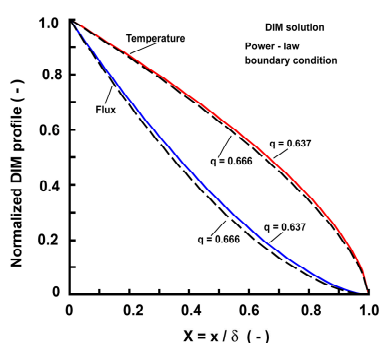
Оптимизацията на функцията на остатъчната грешка, чрез минимизиране на средноквадратичната грешка по дължина на термичния слой, по отношение на q , води до $n_{\text{opt}(m=2.437)} \approx 3.501$.

Нормализираният температурен профил е

$$\frac{T_a(x, t)}{T_{s0} (t/t_s)^k} \approx \left(1 - \frac{\eta_H}{[2.684/a_s (1+4.347k)]} \right)^{0.649} \quad (43)$$

Средната стойност на повърхностния топлинен поток $\Phi_a = -D_G [\partial T_a^4(0, t)/\partial x]$ е

$\Phi_a = \left[T_{s0} (t/t_s)^k \right]^4 (4q/\delta_H)$ или в нормализирана форма като $\Phi_a / \left[T_{s0} (t/t_s)^k \right]^4 = (4q/\delta_H)$. Нормализираните решения, получени чрез DIM (43), като функция на променливата n_H , са показани на Фиг.2.



Фиг. 2. Решения чрез DIM като нормализирани профили за температурата и топлинния поток при стенно (растящо и зависещо от времето) гранично условие.

ИЗВОДИ

Това изследване показва ефективността на метода са двойно интегриране за решаване на радиационно-дифузионното уравнение. Беше потвърдено, че техниката на решение развита в [12] (Глава 1.2) е ефективна и води до явни, в затворена форма, приближени решения.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] S. Rosseland, *Astrophysik und atom-theretische Grundlagen*, Springer-Verlag, Berlin (1931).
- [2] K.E Lonngren, W.F.Ames, A. Hirose, J. Thomas, Field penetration into plasma with nonlinear conductivity. *The Physics of Fluids*, 17 (1974), 10, pp., 1919-1920
- [3] P. Broadbridge, M.M. Lavrentiev, and G.H. Williams, Non-linear heat conduction through externally heated radiant plasma: Background analysis for numerical study, *J. Math Anal. Appl.*, 238 ((1999),2, pp.353-368.
- [4] A.Tilloua, L.Libersart, A.Joulin, B. Monod and G. Jeandel, Dtermination of physical properties

of fibrous thermal insulation, *EPJ Web of Conferences*, 33, 02009 (2012, doi:10.1051/epjconf/20123302009.

- [5] C.C. Smith, Solutions of the radiation diffusion equation, *High Enrgy Density Physics*, (2010),1, pp. 48-56.
- [6] J.-F Clourt, The Rosselnd approximation for radiative transfer problems in heterogeneous media, *J. Quant.Spectrosc. Radiat. Transfer*, 58 (1997), 1,pp. 33-43.
- [7] E.Magyari, A. Pantokratoras, Note on the effect of thermal radiation in linearized Rosseland approximation on heat transfer in various boundary layer flows, *Int.Comm.Heat Mass Transfer*, 38 (2011),5, pp 554-556.
- [8] J. Garnier, G.Malinie, Y.Saillard and C.Chérif-Clerouin, Self-similar solution for non-linear radiation diffusion equation, *Phys. Plasmas*, 13 (2006) , 9, doi:10.1063/1.2350167
- [9] R.E. Marshak, Effect of Radiation on shock wave behaviour, *The Physics of Fluids*, 1 (1958), 1, pp. 24-29 .
- [10] G.I. Barenblatt, On some unsteady motions of a liquid or a gas in a porous medium., *App. Math Mech.* 16 ((1952) ,1, pp. 67-78
- [11] Ya. B. Zeldovitch and Yu.O. Raizer, *Physics of shock waves and high temperature hydrodynamic phenomena* , Academic, New York (1966)
- [12] J.Hristov , Integral solutions to transient nonlinear heat (mass) diffusion with a power-law diffusivity: a semi-infinite medium with fixed boundary conditions, *Heat Mass Transfer*, 52 (2016) ,3, pp. 635-655,
- [13] A.Fabre and J. Hristov, On the integral-balance approach to the transient heat conduction with linearly temperature-dependent thermal diffusivity, *Heat Mass Transfer*, 53 (2017), 1, pp. 177-204.
- [14] J. H. Hammer and M.D. Rosen, A consistent approach to solving the radiation diffusion equation, *Phys. Plasmas* 10, 1829 (2003); doi: 10.1063/1.1564599

Глава 4.5

СУБДИФУЗИОННО УРАВНЕНИЕ ОТ ЧЕТВЪРТИ РЕД МОДЕЛИРАЩО ПРОЦЕСА* НА ТЕРМИЧНО НАБРАЗДЯВАНЕ:

Интегрален подход за получаване на приближено решение на модела на Mullins

Разгледано е приложението на интегрален метод, с техника на многократно интегриране, за получаване на приближено аналитично решение на субдифузионно уравнение от висок порядък. Новият метод наречен Метод с Многократно Интегриране (Multiple-Integral balance Method, MIM) използва процедура с многократно интегриране по отношение на пространствената координата и, всъщност, е обобщение на широко използваните Метод на Интегралния Топлининен Баланс (Heat-balance integral method) на Goodman и на Метода с Двойно Интегриране (Double Integration Method, DIM) на Волков. Методът е демонстриран чрез решение на линеен субдифузионен модел на Mullins за термично набраздяване чрез повърхностна дифузия.

1. ВЪВЕДЕНИЕ

1.1. Дифузионен модел на Mullins от четвърти ред за термично набраздяване

Процесът на еволюция на термично образуваща се бразда, чрез механизъм на изпарение-кондензация, може да се моделира чрез нелинейното уравнение [1,2]

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \left[\frac{D(0)}{1 + (\partial u / \partial x)^2} \right] \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (1)$$

$$\frac{\partial u(0, t)}{\partial x} = u_0 = \text{const.}, \quad \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \rightarrow 0 \text{ as } x \rightarrow \infty,$$

$$u(x, 0) = 0$$

с гранични условия [1]

* Публикувано като: J. Hristov, Fourth-order fractional diffusion model of thermal grooving: Integral approach to approximate closed form solution of the Mullins model, *Math. Model. Nat. Phenomena*, **xxxx-xxxx** (2018); DOI: <https://doi.org/10.1051/mmnp/2017080>

$$u_x(0, t) = m, \quad u(\infty, t) = u_{xx}(0, t) = u_{xxx}(0, t) = 0,$$

$$\int_0^\infty u(x, t) dx = 0, \text{ за } t \geq 0 \quad (2)$$

Последното начално условие $u(x, 0) = 0$ означава, че браздата започва да расте върху гладка повърхност, докато последното интегрално гранично условие следва директно от (1) (виж също уравнение (3) и $u(\infty, t) = u_{xx}(0, t) = u_{xxx}(0, t) = 0$.

Разглеждайки браздата, симетрична относно $x = 0$, ние можем да фокусираме вниманието си само върху профила по направление на оста $x \geq 0$ (виж Фиг.1a). За малка кривина на повърхността (когато $u_{xx} \ll 1$) и доминиращ механизъм на повърхностна дифузия, е възможно неговото линеаризиране във вида [1]

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -B \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}, \quad \frac{\partial u(0, t)}{\partial x} = m, \quad m > 0, \quad \frac{\partial^3 u(0, t)}{\partial x^3} = 0, \quad 0 < x < \infty, \quad t > 0 \quad (3)$$

Уравнение (3) беше решено приближено чрез новата техника на метода на интегралния баланс наречена Метод с Многократно Интегриране (Multiple Integral-Balance Method, MIM) [6] (виж Глава 1.6 и обясненията в текста на тази глава). Настоящото изследване разглежда поучаването на приближено решение на субдифузионна версия на модела (3) с използване техниката на MIM.

1.2. Дробно-диференциална версия на модела на Mullins

Дробно-диференциалната (субдифузионна) версия на линеаризания модел на Mullins (3) беше предложен от Abu Hamed and

Nepomnyshchy [7] чрез проста формална фракционализация, а именно

$$\frac{\partial^\mu u}{\partial t^\mu} = -B \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}, \quad \frac{\partial u(0,t)}{\partial x} = m, \quad m > 0, \quad \frac{\partial^3 u(0,t)}{\partial x^3} = 0, \\ 0 < x < \infty, \quad t > 0 \quad (4)$$

Тук $\frac{\partial^\mu u}{\partial t^\mu} = D_t^\mu$ е дробна по време производна на Caputo, но не съществуват ограничения да бъде използвана и производната на Riemann-Liouville derivative.

2. Метод многократно интегриране приложен към субдифузионно уравнение

Идеята да се приложи МІМ към субдифузионно уравнение с порядък p на лапласиана, стриктно следва правилата описани подробно в Глава 1.6. Следователно, със субдифузионния модел (5)

$$\frac{\partial^\mu \theta}{\partial t^\mu} = b \frac{\partial^p \theta}{\partial x^p} \quad p \geq 2 \quad (5)$$

и прилагайки оператора L_k получаваме

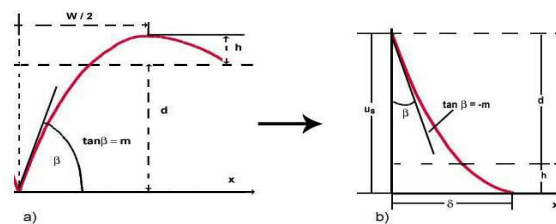
$$\int_0^\delta \left\{ \underbrace{\int_0^\delta \int_0^\delta \int_0^\delta \frac{\partial^\mu \theta(x,t)}{\partial t^\mu} dx dx dx \dots}_{k-1} \right\} dx = \\ = \int_0^\delta \left\{ \underbrace{\int_0^\delta \int_0^\delta \int_0^\delta \left[b \frac{\partial^p \theta(x,t)}{\partial x^p} \right] dx dx dx \dots}_{k-1} \right\} dx \quad (6)$$

Интегралното съотношение (6) отчита факта, че когато $\mu \neq 1$, правилото на Leibniz за диференциране по знака на интеграла е неприложимо [8]. Версиите HBIM и DIM следват от (6) при $\mu = 1$.

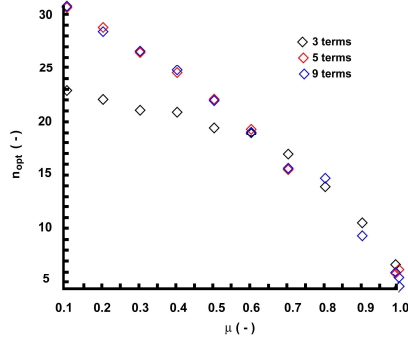
3. РЕШЕНИЕ ЧРЕЗ МІМ

2.1. Апроксимиращ профил

Приближеното решение използва апроксимиращ профил, дефиниран като $u_a = u_s (1 - x/\delta)^n$. Прилагайки граничното условие (3) ние получаваме $u_s = u_a(0,t) = m(\delta/n)$, резултат който съвпада с този от класическата задача на Neumann, решена чрез HBIM и DIM. Тук $u_s = d + h$ означава дълбочината на браздата, докато дълбочината на проникване δ съответствува на половината ширина от отвора (устата на браздата), а точно $\delta = w/2$ (виж Фиг.1). С основната концепция на метода, свързана с физическата картина, следните гранични условия $u_x(\delta) = u_{xx}(\delta) = u_{xxx}(\delta) = 0$ се изпълняват автоматично от апроксимиращия профил. Ние ограничаваме профила на браздата до точката на инфлексия ($x = w/2$), защото тук реалният профил спира да се развива и след тази точка започва повърхността на съседната бразда.



Фиг.1. Схематично представяне на дясната половина на браздата (a) и обърнатия профил (b), който наподобява решението на класическата дифузионна задача и ясно обяснява причината за използване на интегралния метод (адаптирано от Глава 1.6)



Фиг.2 Оптимални експоненти като функции на дробния порядък μ и брой на членовете от ограничените апроксимиращи редове като параметър.

3.2. Дълбочина на проникване: Решение чрез ММ

Сега, използвайки безмерната променлива $0 < z = x/\delta < 1$ и с $k = 4$, получаваме

$$\int_0^1 \frac{\partial^\mu \delta^5}{\partial t^\mu} \left(\frac{m}{n} \right) \left\{ \int_z^1 \int_z^1 \int_z^1 [z(1-z)^n] dz dz dz \right\} dz = mBu(0, t) \quad (7)$$

$$\frac{\partial^\mu \delta^5}{\partial t^\mu} = B\delta \frac{N_4}{n} \quad (8)$$

$$N_4 = \frac{\Gamma(n+k+1)}{\Gamma(n)}, \quad k = 4 \quad (9)$$

За $\mu = 1$, решението на (8), с начално условие $\delta(t = 0) = 0$, е (Глава 1.6)

$$\delta = (Bt)^{1/4} M_4^{1/4}, \quad M_4 = \frac{N_4}{n} = \frac{\Gamma(n+5)}{\Gamma(n+1)} \quad (10)$$

Когато $0 < \mu < 1$, решението на (8), е

$$\delta = (Bt)^{\frac{\mu}{4}} \left(\frac{1}{\Gamma(1+\mu)} \frac{N_4}{n} \right)^{\frac{1}{4}} = (Bt)^{\frac{\mu}{4}} (M_4)^{\frac{1}{4}} M_4 = \frac{N_4}{n} \quad (11)$$

Следователно, приближено решение е

$$u_a^\mu(x, t) = (Bt)^{\mu/4} \left(\frac{m}{n} M_4^{1/4} \right) \left(1 - \frac{x}{(Bt)^{1/4} M_4^{1/4}} \right)^n \quad (12)$$

Вижда се ясно, че апроксимиращият профил (12) дефинира по естествен път не-Болцманова променлива $\eta_M^\mu = x/(Bt)^{\mu/4}$, която за $\mu = 1$ се редуцира до $\eta_M = x/(Bt)^{1/4}$.

Оптимизационната процедура разработена за моделите решавани в Част 2 показва, че n_{opt} получени с 3, 5 и 9 члена на (41) съвпадат. Всички стойности на n_{opt} се стремят към $n \approx 4.55$ получена за $\mu = 1$.

Резултатите показани на Фиг.2 ясно показват, че 9 члена от реда (41) са достатъчни за се осигури сходимост на стойностите на оптималните експоненти. Крайните резултати са представени в Таблица 1.

Таблица 1. Оптимални експоненти получени чрез 9 члена на реда апроксимиращ приближения профил

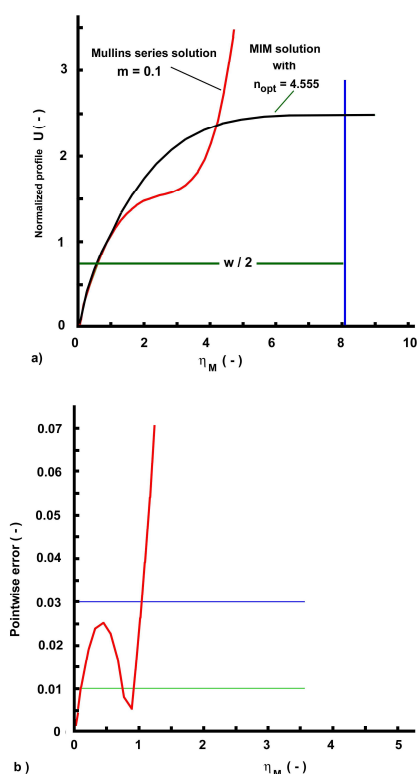
μ	0.1	0.2	0.3	0.5	0.6	0.7	0.99
n_{opt}	30.72	28.78	26.45	22.07	19.31	15.49	5.790
E	0.322	0.254	0.198	0.0091	0.0614	0.0291	0.0029

4. Числени симулации

4.1. Случай с $\mu = 1$

Преди всичко, ние искаме да сравним приближеното решение получено чрез ММ с това на Mullins за $\mu = 1$. Както е показано на Фиг.3а, решението на Mullins става неконтролируемо (tends to blow-up), когато η_M надвиши $\eta_M \approx 2$, докато профилът на ММ е плавен и поведението му е физически адекватно. Още повече, както е отбелязано в текста под фигурата, половината от устата на браздата ("groove mouth"), означена като $w/2$,

съответствува на случая когато $x/\delta = 1$, т.е. когато $\eta_M = M_4^{1/4}$, което също е физически адекватен резултат. Абсолютната грешка на МИМ, по отношение на решението на Mullins, е показана на Фиг.3b. В контекста на предишните коментари, става ясно, че в границите, където решението на Mullins има разумно физическо поведение, абсолютната грешка на МИМ не надхвърля 0.03, независимо от факта, че $\eta_M \geq 2$ решението на Mullins е нереално.



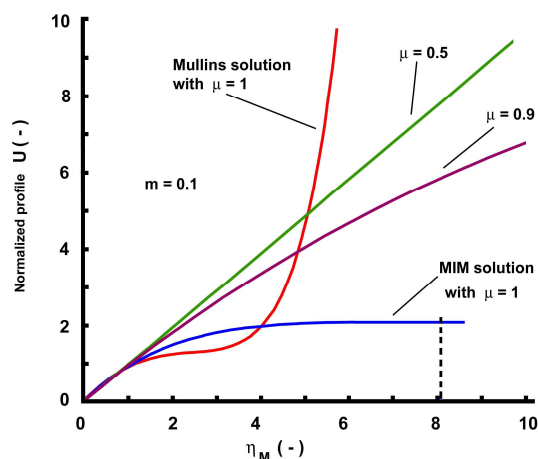
Фиг.3. Сравнение на приближеното решение на Mullins с това получено чрез МИМ (оптимални експоненти) за $\mu=1$ (а) и абсолютни грешки (б): хоризонталните линии маркират две нива на абсолютните грешки. Бележка: Максималната стойност на δ е равна на $w/2$ (виж Фиг.1), когато $\eta_M = (M_4)^{1/4}$; с $n \approx 4.555$ ние имаме $w/2 \approx 8.106(Bt)^{1/4}$.

4.2. Случай с $0 < \mu < 1$

Числените симулации с приближените МИМ решения са показани на Фиг.4. Тук трябва да отбележим, че на предхождащата Фиг. 3а, профилите са нормализирани по отношение на мащаба за дължина, т.е. $U_a = u_a(x, t) / [m(Bt)^{1/4}] = (M_4^{1/4}/n)(1 - \eta_M/M_4^{1/4})^n$ (виж уравнение 26) и поради това вертикалната ос (ординатата) не е напълно нормализирана; множителят $(M_4^{1/4}/n)$ пред профила зависи от стойността на n . Когато $0 < \mu < 1$ ние имаме строга зависимост $n_\mu = f(\mu)$ (виж Фиг.2), а именно: малки стойности на μ съответствуват на високи стойности на $n(\mu)$, а от там и високи стойности на $(M_4^{1/4}/n)$, като най-стръмните профили отговарят на малък дробен порядък. Този изчислителен ефект има ясно физическо значение: малки стойности на μ , по-бавна повърхностна дифузия и като следствие по-бавно формиране на повърхността на браздата. С увеличаване на стойността на μ имаме по-бърза повърхностна дифузия и формирането на браздата се ускорява; профилите достигат максимални стойности по-рано, когато имаме високи стойности на μ .

4.3. Дълбочина на браздата за $0 < \mu < 1$

Следвайки основния модел, дълбочината (максималната) на браздата съответствува на $u(0, t)$ и при решение чрез МИМ имаме (дълбочината на браздата е означена с G_0)



Фиг.4. Нормализирани профили на повърхността на браздата. Сравнение между решенията на модела с цял порядък ($\mu=1$) и дробно диференциалния (субдифузионен) модел. Ефектът на дробния порядък върху наклона на кривите (посредством стойностите на оптималните експоненти е силно изразен (виж фиг.2 за ефекта на μ върху n_{opt}).

$$G_0 = u_a(0, t) = m(Bt)^{1/4} \frac{M_4^{1/4}}{n} \quad (51)$$

Скоростта, с която G_0 расте във времето е

$$dG_0/dt = \frac{1}{4} m B^{1/4} \frac{M_4^{1/4}}{n} t^{-3/4}. \quad \text{Следователно,}$$

скоростта винаги е пропорционална на $t^{-3/4}$, което просто означава, че процесът затихва във времето. Обаче, абсолютната стойност на G_0 , мащабирана с $m(Bt)^{1/4}$, нараства с намаляване на дробния порядък, понеже отношението $M_4^{1/4}/n$ расте с намаляване на стойността на μ . Това физически означава, че при по-бавната повърхностна дифузия се образуват по-дълбоки бразди, в сравнение с тези получени при по-бързите процеси съответстващи на високи стойности на μ . В светлината на тези

коментарии, ние трябва да помним, че даже при $\mu=1$ процесът има субдифузионен характер, защото $u_a(x, t) \equiv (Bt)^{1/4}$ (и $\delta(t) \equiv (Bt)^{1/4}$, също). Ефектът на μ върху дълбочината на браздата може да се види от профилите на Фиг.4, по-точно, дистанцията между абсцисата и сектора с насищане на профилите намалява с нарастване на стойността на μ и обратно.

ИЗВОДИ

Тази глава представя решение на субдифузионен модел на термично набраздяване (модел на Mullins) чрез метод с многократно интегриране, наскоро предложен в [6]. Методът позволява да се реши приближено субдифузионното уравнение с висок порядък на дифузионния член и дава възможност да се види физическата адекватност на получените резултати чрез оценка на решенията относно ширината и дълбочината на браздата и влиянието на дробния параметър върху развитието на процеса на повърхностна дифузия.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Mullins, W.W. Theory of thermal grooving, J. Appl. Phys, 28 91957) ,3, pp.333-339.
- [2] P. Broadbridge, Exact solvability of the Mullins nonlinear diffusion model of groove development, J. Math. Phys, 30 (1989), 7, pp.1648-1651.
- [3] P. Broadbridge, Exact solution of a degenerate fully nonlinear diffusion equation, Z.angw.Math.Phys, 55 92004), pp.534-538. doi:10.1007/s00033-004-3015-1
- [4] Kitada, A. On properties of a classical solution of nonlinear mass transport equation $u_t = u_{xx}/(1+u_x^2)$, J. Math. Phys, 27 (1986), 7, pp.1391-1392.
- [5] Robertson, Grain-boundary growing by surface diffusion for finite slopes, J. Appl. Phys, 42 (1971), 1, pp.463-467.

- [6] Hristov, J., Multiple integral-balance method: Basic idea and an example with Mullin's model of thermal grooving, *Thermal Science*, 21 (2017), pp.1555-1560.
- [7] M. Abu Hamed, A.A. Nepomnyashchy, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 298–299 (2015),1,pp. 42-47
- [8] Podlubny,I, *Fractional Differential Equations* , Academic Press, New York, 1999

Глава 4.6

НОВО ПРИБЛИЖЕНО РЕШЕНИЕ НА ДИФУЗИЯ С НЕЛИНЕЙНОСТ НА FUJITA¹

Случай на дифузионно контролирана адсорбция с правоъгълна изотерма

Получено е ново приближено решение свързано с правоъгълни абсорбционни изотерми (изотерми на Лангмюр) чрез метода на интегралния баланс и техниката на двойно интегриране. Решението разглежда модела развит от Ruthven за правоъгълна и сферична геометрия, когато адсорбцията се контролира от дифузията в макропорите. Този модел води до концентрационно-зависим дифузионен коефициент с квадратична нелинейност на Fujita. Новото приближено решение се основава на концепцията за крайно дълбочина на проникване на дифузанта и практически правоъгълна форма на концентрационния профил. Решението използва апроксимиращ параболичен профил с недефинирана експонента. Анализът на решението позволява да се определи оптималната експонента на апроксимиращия профил като функция на нелинейния параметър на концентрационната зависимост на Fujita. Приближените решения са сравнени със съществуващите експериментални резултати публикувани в литературата, а по-точно резултатите получени от Ruthven и Crank.

1. ВЪВЕДЕНИЕ

1.1. Адсорбция с нелинейни дифузионни коефициенти: теория

Абсорбционните системи с нелинейни абсорбционни изотерми, като правило, се контролират от нелинейни дифузионни процеси, чийто модели са с коефициенти на дифузия зависещи от концентрацията [1,2,3]. Тъй като движещата сила на такива процеси не е

концентрационния градиент (както е при дифузията на Фик), а градиента на химичния потенциал $\partial \ln p / \partial \ln q$ [3,4,5], то връзката между концентрацията и истинския дифузионен коефициент е [1]

$$\frac{D}{D_0} = \left(\frac{\partial \ln p}{\partial \ln q} \right)_T \quad (1)$$

В този случай, отношението D/D_0 води до нелинейна концентрационна зависимост (виж дефиницията на параметъра λ по-нататък в текста, а по-точно уравнения 3а и 5)

$$\frac{D}{D_0} = \frac{1}{(1 - \lambda u)^2} \quad (2b)$$

Когато, обаче, дифузията в макропорите е контролиращия процес [1,4] и изотермите са от тип Лангмюр, нелинейната зависимост на коефициента на дифузия от концентрацията се представя от уравнение (2b) (виж изложението в следващата точка). Двата типа нелинейности описващи концентрационно-зависими дифузионни коефициенти се наричат нелинейности на Fujita [6,7] (виж също Глава 1.8).

По-нататък, тази глава разглежда основно нелинейност от тип **F2** (у-ние. 2b) възникваща при адсорбционни системи от тип Лангмюр с практически правоъгълни изотерми (Langmuirian systems with almost rectangular (irreversible) isotherms) [1,4,8, 9, 10,11,12, 13], където концентрационните профили имат формата на ударна вълна (where concentration profiles attend shapes of shock waves) проникваща в дълбочина на адсорбента със скорост намаляваща във времето. Случаят на дифузионно-

¹ Публикувано като (съответства на): [Hristov J., A new closed-form approximate solution to diffusion with quadratic Fujita's non-linearity: The case of diffusion controlled sorption kinetics relevant to rectangular adsorption isotherms, Heat Mass Transfer, Submitted, July, 2017- under review](#)

контролирана адсорбция протичаща в макропорите на адсорбента е основният модел разглеждан тук.

1.2. Основен модел: От изотермата на Лангмюр до нелинейност F2

Абсорбционните системи с нелинейни В композитни адсорбенти, с абсорбционни капацитети контролирани (разположени) в микрочастиците, но в същото време с кинетика контролирана от дифузията в макропорите (с порьозност ε), моделното уравнение за правоъгълна геометрия (a slab configuration) е [1,2]

$$(1-\varepsilon) \frac{\partial q}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon D_p \frac{\partial c}{\partial x} \right) \quad (3a)$$

Въвеждането на безизмерните променливи $\lambda = q_0/q_s$ и $u = q/q_s$, и отчитайки, че [1,2] $\partial c/\partial x = (\partial c/\partial x)_t / (\partial q^*/\partial c)$ уравнение (3a) може да се представи чрез безизмерната променлива $u = q/q_0$ във вида

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_0}{(1-\lambda u)^2} \frac{\partial u}{\partial x} \right], \quad \lambda = \frac{q_0}{q_s} \quad D_0 = \frac{\varepsilon}{1-\varepsilon} \frac{D_p}{K}, \quad (4a,b)$$

За модела на Лангмюр връзката $c_0/q_s = \lambda/[K(1-\lambda)]$ води до $D_\infty/D_0 = 1/(1-\lambda)^2$ и за $\lambda \rightarrow 1$ изотермата се стреми асимптотично към правоъгълната форма (the isotherm approaches the rectangular (irreversible) limit) [1]. Освен това, $D_e = D_0/K(1-q/q_s) = D_0/(1-\lambda u)^2$ дефинира

ефективния коефициент на концентрационно-зависима дифузия.

2. РЕШЕНИЕ НА ПРОБЛЕМА

2.1. Начална трансформация на дифузионния член с квадратична нелинейност

Методът на интегралния баланс, използван в това изследване, избягва широко познатата начална трансформация на нелинейното уравнение (4) чрез въвеждане на Болцмановата променлива $\xi = x/\sqrt{D_0 t}$, позната от работите на Crank [38,39,40, 41, 42], за да се получи нелинейно обикновено диференциално уравнение governing equation (4) (ODE) (виж книгата на Crank [3] и Глава A1 тук).

Следователно, моделното уравнение (5a) може да се представи във вида

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{D_0}{\lambda} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\frac{1}{(1-\lambda u)} \right] \quad (5)$$

Уравнение (5) е основното уравнение използвано при следващото развитие на приближеното решение.

2.2 Правоъгълна геометрия (паралелепипед) (Slab pellet) (DIM решение)

Резултатът от двойното интегриране на зависещия от времето член на (16) е добре познат [21,35]

$$\delta_{DIM}(t) = \sqrt{D_0 t} \sqrt{(n+1)(n+2)} M(\lambda),$$

$$M(\lambda) = \sqrt{\frac{1}{(1-\lambda)}} \quad (6)$$

Тъй като $0 > \lambda < 1$, то множителят (the augmentation factor) $M(\lambda)$ е винаги

положителен. От (6) ние можем да видим, че нарастването на нелинейността, когато стойността на λ расте, прави разликата $(1-\lambda)$ все по-малка, и в резултат ефективния дифузионен коефициент $D_0/(1-\lambda)$ се увеличава. Освен това, този ефект може да се разглежда като *удължаване* (lengthening) на дълбочината на проникване с множител $\gamma = 1/\sqrt{1-\lambda}$, т.е. можем да представим $\delta(t)$ като $\delta(t)_{a=1} = \gamma\delta_0$. Тук, ние може да имаме две екстремни ситуации: *линеен случай* (постоянен дифузионен коефициент) за $\lambda = 0$, водещ до $\gamma = 1$ и *правоъгълен концентрационен профил* (Следователно, от физическа гледна точка, нарастването на стойността на λ води до нарастване на стойността множителя $M(\lambda)$ и резултатът е по-големи дълбочини на проникване. В обратния случай, намаляването на λ , редуцира $M(\lambda)$ и като следствие ние получаване по-къси дълбочини на проникване, което съответствува на по-бавен дифузионен процес.

2.3. Приближен концентрационни профил

Следователно, приближеното решение (концентрационен профили) е

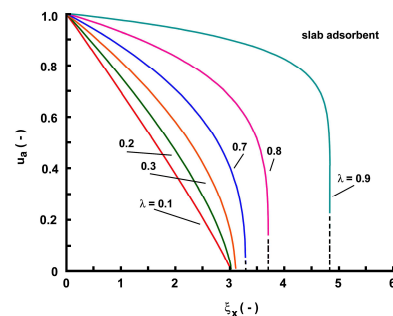
$$u_a = \left(1 - \frac{\xi_x}{N(n)M(\lambda)}\right)^n, \quad \xi_x = \frac{x}{\sqrt{D_0 t}}$$

$$\text{или } \xi_x = 2\xi_{xC}, \quad (7a,b)$$

$$N(n)_{DIM} = (n+1)(n+2) \quad (7c)$$

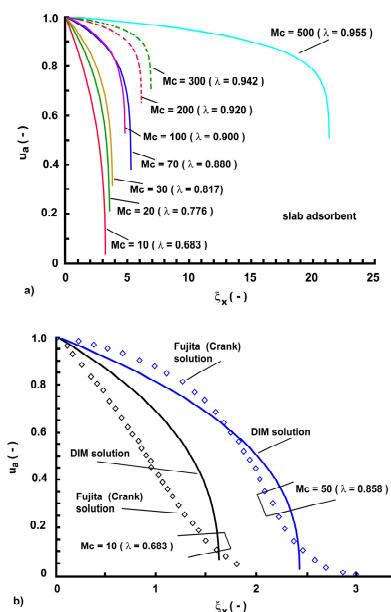
Приближеният профил генерира, по естествен начин, Болцмановата променлива

$\xi_x = x/\sqrt{D_0 t}$, където $\sqrt{D_0 t}$ играе ролята на характеристична дължина по време на периода $0 < t < t_L$. Качествени профили, с предварително зададени експоненти на апроксимиращия профил, са показани на Фиг.1. Тези резултати потвърждават поведението на профилите получено от Crank [3], където параметърът на решението е $Mc = 1/(1-\lambda)^2$, както е показано на Фиг. 2, независимо от факта, че параметърът $1/(1-\lambda)$ следва естествено от решението. Независимо от това, ние трябва да отчитаме факта, че използването на $Mc = 1/(1-\lambda)^2$, като параметър, е също естествено, защото дифузионния коефициент на нелинейното уравнение (виж уравнение 5a) е $D = D_0/(1-\lambda u)^2$, т.е. Mc е фактор (умножаващ, увеличаващ) на дифузионния коефициент.



Фиг.1. Качествени концентрационни профили за правоъгълен адсорбент като функция на автомоделна променлива ξ_x за различни стойности на нелинейния параметър λ . DIM решение. Стойностите на експонентата $n(\lambda)$ са изчислени чрез уравнение (53).

Безмерната променлива ξ_C , дефинирана в (25), е използвана в решенията на Fujita [6,7] и Crank [3].



Фиг.2. Концентрационни профили в правоъгълен адсорбент като функция на автомоделната променлива ξ_x , за различни стойности на нелинейния параметър.

Съответните стойности на λ са поставени в скоби.

а) DIM решения получени в това изследване
 б) Сравнение на DIM решение и резултати от [3]. Точките са получени чрез дигитализация на Фиг.9.3 в [3]. Това е решението на Fujita [7] възпроизведено в [3].

2.4 Относително количество на адсорбирана маса (относително насищане на адсорбента)

Адсорбираната маса за време t се представя чрез интеграл по дължина на дифузионния слой за $\delta \leq x \leq 0$ (т.е. за периода $0 \leq t \leq t_L$). В момента $t = t_L$ фронтът достига границата $\delta = L$ (центъра на блока). Следователно, имаме

$$m_a(t) = 2 \int_0^\delta u_a(x, t) dx = 2 \int_0^\delta \left(1 - \frac{x}{\delta}\right)^n dx = 2 \frac{\delta}{n+1} \quad (8)$$

След това, с израза получен за дълбочината на проникване (ние използваме решението чрез

DIM), относителното количество на акумулираната маса в адсорбента $m_a(t)/m_\infty$ е

$$\frac{m_a(t)}{m_\infty} = \sqrt{\frac{D_0 t}{L^2}} \sqrt{\frac{1}{1-\lambda}} \sqrt{\frac{(n+2)}{(n+1)}}, \quad m_\infty = Lu(0, t) = L \quad (9a, b)$$

Следователно, $m_a(t)/m_\infty = (\delta/L)/(n+1)$ може да се разглежда като *относителна дължина на сорбционния фронт* с L като мащаб за дължина.

Сега, отчитайки, че $t_0 = L^2/D_0$ е характеристикното време на дифузионния процес, следва, че числото на Фурие е $Fo = t/t_0 = D_0 t/L^2 = [D_p \epsilon t / KL^2 (1-\epsilon)]$.

Следователно, относителното количество на адсорбирана маса, представена чрез (10a,b), може просто да се изрази като

$$\frac{m_a(t)}{m_\infty} = \sqrt{Fo} \sqrt{\frac{1}{1-\lambda}} \sqrt{\frac{(n+2)}{(n+1)}} \quad (10)$$

2.5. Основно допускане за функционалната зависимост $n(\lambda)$

С цел да се демонстрират характеристики на профила $(1-x/\delta)^n$ при новите решения, ние правим предположение (а conjecture) за следната функционална зависимост свързваща n и λ , а именно

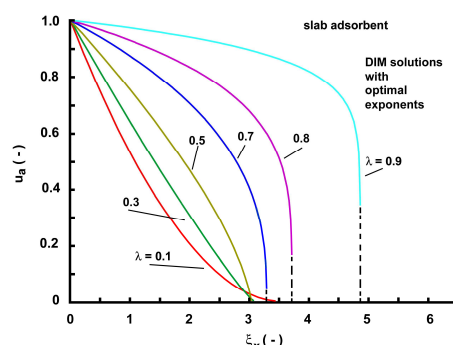
$$n = n_0 \frac{1-\lambda}{1+\lambda} = n_0 F_n(\lambda), \quad n = n_0 \text{ за } F_n(\lambda) = 1 \quad (11)$$

Тук $F_n(\lambda)$ е функционална зависимост с асимптоти $F_n(\lambda=0)=1$ и $F_n(\lambda=1)=0$. За $\lambda=0$ получаваме класическата стойност $n=2$ за решението на Гудман [15,16], ако $n_0=2$. В този

момент, нека си спомним, че в изследванията на Mitchell and Myers [17], оптималната експонента беше определена като $n_{opt}(\lambda=0) = 2.074$, за решението чрез RIM, което в този случай е еквивалентно на това получено с DIM. Този подход фокусира вниманието върху случая, когато решението u_a е решение в средно на моделното уравнение, защото условието наложено на остатъчната функция $\varphi(u_a(x,t))$ е условие за глобална минимизация по дължина на дълбочината на проникване δ .

3. Приближени решения (концентрационни профили)

Числените симулации на приближените решения (чрез DIM) с оптимални експоненти са показани на Фиг.3. Тези графични представяния ясно показват ефекта на параметъра λ върху формата на концентрационния профил. За малки стойности на λ , приблизително за $\lambda < 0.3$, получаваме вдлъбнати профили, наподобяващи тези съответстващи на моделите, при които дифузионния коефициент не се влияе от концентрацията. С нарастване на стойността на параметъра λ , профилите започват за променят формата си от вдлъбната към изпъкнала, което най-ясно се манифестира при $\lambda > 0.5$. Както беше отбелязано по рано, такива изпъкнали криви се генерират от апроксимиращия параболичен профил, когато $n < 1$ [14]. В този смисъл, настоящите решения позволяват да се види, че те моделират адекватно адсорбционната кинетика при условията наложени от модела на Ruthven..

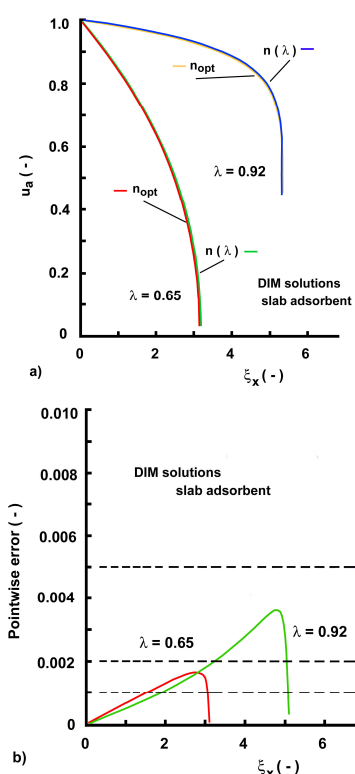


Фиг.3. Приближени концентрационни профили (DIM решения с оптимални експоненти като функция на автомоделната променлива ξ_x за различни стойности на параметъра на нелинейност λ .

3.1. Приближени решения (концентрационни профили) за случаи публикувани в литературата

За сравнение на резултатите от приближените решения ние използваме данните на Ruthven, по-точно тези представени в Таблица 6.3 на [4] и свързани с адсорбция на C_4H_8 и C_3H_8 върху **Davidson C-521 molecular sieve**, под формата на правоъгълни блокчета. В първият случай (C_4H_8 като сорбат) имаме $\lambda = 0.92$ (съответстваща на $Mc = 200$), което води до $n_{opt} = 0.09$ и $n(\lambda) = 0.019$ изчислено чрез (11). С вторият сорбат, имаме $\lambda = 0.65$ (съответстваща на $Mc = 8.163$), водещо до $n_{opt} = 0.447$ и $n(\lambda) = 0.445$. В контекста на анализа на получените решения (когато изотермата е почти правоъгълна) само случаят на адсорбция на C_4H_8 има концентрационен профил с желаната форма (със стръмна предна част), докато при адсорбция на C_3H_8 концентрационната крива също е изпъкнала, но далече от формата на желания правоъгълен профил. Тези два случая са

показани на Фиг. 4а и ние можем да видим, че изчисленията с n_{opt} и $n(\lambda)$ генерират неразличими концентрационни профили. Абсолютните грешки в тези случаи (виж Фиг.4b) сочат, че максималната грешка от апроксимации е по-малка от 0.002 за по-слабо изпъкналата крива, а когато концентрационни профил стане по-стръмен, грешката може да нарасте до 0.0035, но основно в зоната на стръмния фронт на решението.



Фиг.4. Сравнение на решенията получени в това с изследване (изчислени с оптималните експоненти n_{opt} и $n(\lambda)$ - уравнение (53)) за две стойности на параметъра λ взет от Таблица 6.3. на книгата на Ruthven [4]
 а) Концентрационни профили като функция на автомоделната променлива ξ_x
 б) Абсолютни грешки . Решението с оптимална експонента е взето за референтно

8. ДИСКУСИЯ И ОСНОВНИ РЕЗУЛТАТИ

Тази глава представи ново интегрално решение на адсорбционната кинетика при дифузионно контролиран процес в макропорите на адсорбента и почти правоъгълна изотерма от тип Лангмюр. Това са основните условия на модела развит от Ruthven (уравнение 5) в [1,4], към който новата техника на решение беше приложена.

Получените приближени решения използват начална трансформация на дифузионния член на модела и техниката на двойно интегриране (DIM) с приближен параболичен профил с недефинирана експонента. Този подход позволява лесно да се предели дълбочината на проникване δ на дифузанта (сорбата). Концепцията за крайна дълбочина следва директно от физиката на процеса и от идеята, че концентрационните профили се движат като ударни вълни (move as shockwaves).

Решенията позволяват да се установи лесно връзката на експонента на параболичния профил и параметъра на нелинейността λ . Апроксимацията (11) работи твърде добре за големи стойности на параметъра λ , по-точно за $0.9 < \lambda < 1$, където концентрационните профили са почти правоъгълни.

Числените експерименти позволяват да се сравнят новите приближени решения с резултатите на Fujita. За разлика от тези решения, интегралните решения използват концепцията на крайна дълбочина на проникване, която коригира нефизичното поведение на модела на Фик, използван в решението на Fujita [6,7] (Crank [3]), които формират основата на решенията на

Ruthven [1,2,4,8]. Разликите в двата подхода са най-ясно манифестирани от формата на концентрационните профили: решенията чрез интегралния баланс ясно дефинират дълбочината на проникване, докато решенията на Fujita (Crank) имат *затихващи „опашки“*, които не могат ясно да определят къде концентрацията става равна на нула.

Литература

- [1] Ruthven, D.M, The rectangular isotherm model for adsorption kinetics. Adsorption 6 (2000), pp. 287-291.
- [2] Ruthven DM (2004) Sorption kinetics for diffusion-controlled systems with strongly concentration- dependent diffusivity. Chem. Eng. Sci. 59: 4531-4545.
- [3] Crank J The mathematics of diffusion (2nd ed.), Clarendon Press, Oxford 1975.
- [4] Ruthven DM, Principles of adsorption and adsorption processes. Chapter 6, Wiley, New York, 1984.,
- [5] Karger J (2003) Measurement of diffusion in zeolites- A never ending challenge?. Adsorption 9: 29-35.
- [6] Fujita H. (1952) The Exact Pattern of a Concentration-Dependent Diffusion in a Semi-infinite Medium. Part II. Textile Research Journal 22: 823-827.
- [7] Fujita H. (1952) The exact pattern of a concentration-dependent diffusion in a semi-infinite medium. Part 1. Textile Research Journal 22: 757-760.
- [8] Garg DR, Ruthven DM (1972) The effect of the concentration dependence of the diffusivity on zeolitic sorption curves. Chem. Eng. Sci. 27: 417-423.
- [9] Zolotarev PP, Ulin VI (1977) Internal diffusion in biporous adsorbent having a rectangular adsorption isotherm. 1. Formulation of the problem and basic equations. Russ Chem Bull. 26:450-454.
- [10] Zolotarev PP, Ulin VI (1977) Internal diffusion in biporous adsorbent having a rectangular adsorption isotherm. 2. Solution of the problem using approximation kinetic functions for microporous formations. Russ Chem Bull. 26: 454-459.
- [11] Zolotarev PP, Ulin VI (1977) Internal diffusion in biporous adsorbent having a rectangular adsorption isotherm. 3. Exact integral equation for the boundary of the adsorption front. Russ Chem Bull. 26: 899-904.
- [12] Dubinin MM , Erashko IT, Kadlec O, Ulin VI , Voloshchuk AM, Zolotarev PP (1975) Kinetics of physical adsorption by carbonaceous adsorbents of biporous structure. Carbon 13:193-200.
- [13] Do DD (1986) Analysis of batch adsorber with rectangular adsorption isotherms. Ind. Eng. Chem. Fundam. 25:321-325.
- [14] Hristov J (2016) Integral solutions to transient nonlinear heat (mass) diffusion with a power-law diffusivity: a semi-infinite medium with fixed boundary conditions. Heat Mass Transfer 52:635-655.
- [15] Goodman TR (1964) Application of Integral Methods to Transient Nonlinear Heat Transfer. In: Advances in Heat Transfer, T. F. Irvine and J. P. Hartnett, eds., 1:51–122 Academic Press, San Diego, CA
- [16] Hristov J (2009) The heat-balance integral method by a parabolic profile with unspecified exponent: Analysis and Benchmark Exercises. Thermal Science 13:27-48.
- [17] Mitchell SL, Myers TG (2010) Application of standard and refined heat balance integral methods to one-dimensional Stefan problems. SIAM Review 52: 57–86

ЧАСТ 4

НЯКОИ ПРИЛОЖЕНИЯ: ПРИМЕРИ

ОСНОВНИ РЕЗУЛТАТИ И ПРИНОСИ

Получените приближени решения на важни в технологично отношение примери с различни видове нелинейност релаксации, моделирани с оператори с памет, позволяват да се формулират следните основни резултати и научни приноси.

1. ОСНОВНИ РЕЗУЛТАТИ:

1. Глава 4.1 Получени са приближени интегрални решения на нелинейното дифузионно уравнение на Додсън, както от цял порядък, така и на формално фракционализирани версии. Като добър пример от това изследване, е фактът, че е възможно решение чрез автомоделна променлива (similarity solution) след начална нелинейна трансформация.

Всъщност, това са първите получени до сега решения, при които временната еволюция на фронта на дифузия може явно да се изрази в явен вид. Използването на оператора на Caputo-Fabrizio позволява да се получи формално фракционализиран модел и прилагайки метода на интегралния баланс директно да се генерира не-Болцманова автомоделна променлива, която инкорпорира дифузионния коефициент и скоростната константа (реципрочна на дефинираното релаксационно време τ).

Тъй като уравнението на Додсън е оригинално конституирано да предсказва крайната дълбочина на проникване на дифузионния слой, с използване на производната на Caputo-Fabrizio, резултатите са в явен вид и физически адекватни. Още повече, това решение позволява директно да се свърже дробния порядък на фракционализираното уравнение с физически дефинираната скоростна константа (реципрочна на релаксационното време).

2. Глава 4.2 Решена е първата задача на Стокс, за модели от цял и дробен порядък, за флуид на Casson с използване на различни видове дробни (по време) производни. Направен е критичен анализ на използваните до този момент модели и са проведени експериментни чрез формална фракционализация и дефиниране на конститутивни уравнения. Приближените решения са получени чрез интегрален метод и параболичен апроксимиращ профил с недефинирана експонента. Дискутиран е проблемът с коректната фракционализация на моделните уравнения. Получени са приближени решения за случаите на модели от цял порядък и дробно-диференциални аналози, и е анализирана физическата адекватност на резултатите.

3. Глава 4.3 представя решение на първата задача на Стокс чрез метод на двойно интегриране, когато релаксацията се моделира със смесена производна по време-пространство. Разгледани са два основни случая: модел от цял порядък и дробно-диференциален модел. За модел, върху който е показана ефективността на DIM е уравнението на ненютоново флуид от втори клас (ред 2) (second-grade fluid). Този подход позволява за се получи физически ясно решение, с добре дефинирани автомоделни променливи, отчитащи както Нютоновите така и Ненютоновите ефекти на нестационарното решение. По-точно, решението показва, че течението се контролира от две безизмерни променливи: Болцманова автомоделна променлива отразяваща вискозното поведение на флуида и число на Deborah свързано с еластичните ефекти. Показано, че числото на Deborah е независима променлива контролираща течението, защото при първата задача на Стокс отсъства мащаб за дължина, позволяващ да се дефинира характеристично време на процеса.

4. Глава 4.4 Получени са явни приближени решения, в затворена форма, на радиационното дифузионно уравнение чрез прилагане на метод на интегралния баланс с двойно интегриране. Решени са

проблеми свързани със скок в повърхностната температура и променящи се във времето гранични условия. Експонентата на апроксимиращия профил и грешката на апроксимация се определят директно чрез минимизация на остатъчната функция на моделното уравнение.

5. **Глава 4.5** разглежда дробно-диференциален модел от 4-ти порядък на повърхностна дифузия (субдифузия) като вариант на уравнението на Mullins. Получено е приближено интегрално решение чрез метода с многократно интегриране (МІМ) предложен от автора (**виж Глава 1.7**). Методът позволява да се реши приближено субдифузионното уравнение с висок порядък на дифузионния член и дава възможност да се види физическата адекватност на получените резултати: чрез оценка на решенията относно ширината и дълбочината на браздата и влиянието на дробния параметър върху развитието на процеса на повърхностна дифузия.

6. **Глава 4.6** представя ново интегрално решение на задача свързана с кинетиката на дифузионно контролирана адсорбция (дифузионен контрол в макропорите на адсорбента) и моделирана чрез квадратична нелинейност на Fujita, която води до правоъгълни изотерми на Лангмюр. Новото приближено решение използва концепцията за крайно дълбочина на проникване на дифузанта и практически правоъгълна форма на концентрационния профил. Решението използва апроксимиращ параболичен профил с недефинирана експонента. Анализът на решението позволява да се определи оптималната експонента на апроксимиращия профил като функция на нелинейния параметър на концентрационната зависимост на Fujita. Получени са ефективни приближени решения на модела формулиран от Ruthven. Получените резултати са сравнени с известните аналитични решения от литературата и експериментални резултати на Ruthven.

2. ОСНОВНИ ПРИНОСИ

1. Получени са приближени интегрални решения на практически важни задачи свързани с технологични процеси: Уравнение на Додсън за дифузия в твърди материали (**Глава 4.1**), нестационарно течение на ненютонов флуид (**Глава 4.3**), радиационно дифузионно уравнение (**Глава 4.4**), субдифузионно уравнение на повърхностна дифузия свързано с процеса на термично набраздяване (**Глава 4.5**).
2. Получено е ново решение свързано с кинетиката на дифузионно контролирана (в макропорите) адсорбция, съгласно модела на Ruthven с квадратична нелинейност на Fujita (**Глава 4.6**).
3. Дискутиран е проблемът с формалната фракционализация на моделните уравнения и физическата адекватност на този подход чрез първа задача на Стокс за флуид на Casson (**Глава 4.2**).

Част В

ОСНОВНИ РЕЗУЛТАТИ И ПРИНОСИ НА ДИСЕРТАЦИЯТА

(и след това)

ЧАСТ В

ОСНОВНИ РЕЗУЛТАТИ, ПРИНОСИ И СЛЕД ТОВА

ПРЕДГОВОР

Това е задължителна част на всяка дисертация, с цел ясно и стройно да се отбележат основните резултати и принос на извършените изследвания. Тъй като тази дисертация включва, ако се съди по физическите приложения на изследваните модели, изследвания в различни посоки, **но въпреки това обединени от методиката на изследванията и получените решения**. За да бъде улеснен анализът на проведените изследвания и да се открият ясно научните приноси, след всяка част, обединяваща група изследвания, беше направена рекапитулация с очертаване на основните резултати и приноси. Това са, така да се каже, локални изводи, които сега трябва да бъдат обединени в един обобщен анализ, който е в съгласие с целите разгледани в началото.

Анализът на получените резултати ще бъде представен в четири основни направления, а именно:

- **Приложения в интегралния метод към нелинейни и аномални дифузионни модели с локални и нелокални производни, и развитие на негови модификации.**
- **Извод (синтез) на дифузионни модели на физични процеси с памет.**
- **Анализ на дифузионни модели с нелокална (сингулярна и несингулярна памет)**
- **Получаване на приближени решения на практически важни задачи.**

В същините направления ще бъдат формулирани и основните приноси от изследванията включени в дисертацията.

1. ОСНОВНИ РЕЗУЛТАТИ

1.1. Приложение на интегралния метод

В това направление могат да се открият три основни области с резултати:

- **Приложения в интегралния метод към нелинейни дифузионни модели с локални производни.**

- Прилагане на интегралния метод към дифузионни модели със сингулярна памет.
- Развитие на модификации на метода

1.1.1. Приложения на интегралния метод към нелинейни и дифузионни модели с локални производни

В контекста на така формулираните три области, преди да изброим основните резултати и приносите, трябва да отбележим, че представените тук изследвания, по-точно получените приближени аналитични решения, за първи път в литературата, разпространяват използването на метода на интегралния баланс върху нелинейни дифузионни задачи с локални производни, по-точно с концентрационно (температурно) зависими дифузионни коефициенти. Ние специално отбелязваме този факт, защото до момента на публикуване на резултатите включени в **Част 1**, този метод е прилаган само за линейни задачи. Успешното прилагане на метода към тези задачи е възможно в резултат на два основни елемента на решението: нелинейна трансформация на дифузионния член (виж специално **Глава 1.8**, а също и съответните точки на всички останали глави от **Част 1**) и използването на обобщения параболичен профил с недефинирана експонента.

1.1.2. Прилагане на интегралния метод към дифузионни модели със сингулярна памет

Втора област на приложение на интегралния метод, за първи път развита в изследванията включени в **Част 2**, са дифузионните уравнения с временна и пространствена памет, използващи сингулярна ядра. Тази ориентация на използване на интегралния метод доведе до развитие на една негова модификация: метод с двойно интегриране (DIM), коментиран накратко тук.

В литературата, до този момент (до публикуването на резултатите по тази дисертация), бяха известни две основни версии на интегралния метод: метода с просто интегриране на Гудман (Heat-balance Integral Method, HBIM) и метода с двойно интегриране, на Волков (Refined Integral Method, RIM). Методът на Гудман е нулев моментен метод, докато RIM използва първият момент на разпределението (концентрация или температура). В тази дисертация RIM и използван само в **Глава 1.2**.

Разширяването на областта на приложение на интегралния метод доведе до формулиране на една нова версия, наречена **Метод с Двойно Интегриране** (Double Integration Method, DIM). DIM се отличава от RIM по това, че е приложим както към модели с локални така и с нелокални производни по време. Тази разширена приложимост на DIM е поради факта, **че не се изисква прилагане на правилото на Лайбниц за диференциране под знака на интеграла**, както е при извода на RIM (виж точка 2 в **Глава 1.2**). DIM е подробно обяснен, стъпка по стъпка, в точка 2 в **Глава 1.3** (а също така в: точка 1.2.2 на

глава 2.1, точка 1.2 на глава 2.2, точка 3.3 на **Глава 2.3**). Възможността да се използва **DIM** при дифузионни модели със сингулярна памет позволи успешни приближени решения на класически линейни (**Глава 2.1**, **Глава 2.2** и **Глава 2.4**) и нелинейни (**Глава 2.3**) субдифузионни модели, а и на супердифузионен модел (с пространствена памет) и постоянен коефициент (**Глава 2.5**).

Първите опити с прилагане на интегралния метод към модели със сингулярна памет бяха публикувани в

Hristov J., Diffusion Models with Weakly Singular Kernels in the Fading Memories: How the Integral-Balance Method can be Applied?, *Thermal Science*, 19(3) (2015), pp. 947-957; DOI: 10.2298/TSCI130803151H

Резултатите са обобщени в

Hristov J., Approximate solutions to time-fractional models by integral balance approach, **Chapter 5**, In: **Fractional Dynamics**, C. Cattani, H.M. Srivastava, Xia-Jun Yang, (eds), De Gruyter Open, 2015, pp.78-109.

В допълнение техниката на DIM позволява решения на:

- Нелинейното уравнение на Додсън (**Глава 4.1**) с локални и нелокални производни
- Субдифузионно уравнение от четвърти порядък (**Глава 4.5**),
- Първа задача на Стокс за ненютонов флуид от втори клас (**Глава 4.3**) със смесени производни от цял и дробен порядък, и аналогична задача за флуид на Casson (**Глава 4.2**).
- Модела на Mullins за случая на термично набраздяване чрез механизма на изпарение-кондензация (**Глава 1.7**).

При моделите с пространствена памет, методът с единично интегриране (NBIM) е достатъчно ефективен, защото в този случай не възниква нужда от двойно интегриране, поради невъзможността да се прилагат трансформациите на дифузионни член, които бяха достатъчно ефективни при моделите с локални производни (**Част 1**). Това позволи успешни решения на два основни модела: със степенна (**Глава 2.6**) и потенциално-степенна (**Глава 2.7**) памет.

Освен това, DIM е приложим не само към модели със сингулярна памет, но и при модели с експоненциална памет (**Глава 4.1** и **Глава 4.2**).

1.1.3. Нови модификации и обобщения на интегралния метод

В това направление, основната техника, въведена от автора, и най-широко използвана в изследванията включени тази дисертация е **Методът с Двойно Интегриране (DIM)**, коментиран по-горе. Друга модификация позволяваща да се избегнат както RIM, така и DIM е използването на производни и интегрални от порядък $1/2$ (**Глава 1.5**). Този метод (виж анализа в точка 4 на **Глава 1.5**)

показва, че имплицитно това е метод с използване на първия момент на разпределението. Освен за случаите на гранични условия на Дирихле и Нюман, развити в **Глава 1.5**, този метод е ефективен и при задачи с променящи се във времето гранични условия (тези резултати не са показани в тази дисертация).

Съществени стъпка в развитието на интегралния подход е **Методът с Многократно Интегриране (МІМ)** (**Глава 1.6**), позволяващ интегрално решение на дифузионни уравнения от ред по-голям от 2. При така направена формулировка на метода, класическият НВІМ на Гудман и нововъведения тук DIM се оказват частни случаи на МІМ. Методът е успешно демонстриран с решение на модела на Mullins за случая на термично набраздяване чрез повърхностна дифузия в оригиналната му формулировка с локални производни (**Глава 1.6**) и субдифузионната му версия (**Глава 4.5**).

1.1.4. Къде се намират DIM и МІМ сред останалите приближени интегрални методи ?

За да бъде ясен приносът на тази дисертация, чрез Метода с Двойно Интегриране (**DIM**) и Метода Многократно Интегриране (**МІМ**), към развитието на интегралния метод, ще представим накратко основната идея на интегралния метод и неговото развитие. Тези основни моменти са показани в Таблица В1, също.

Интегралният метод е следствие от развитието на т.н. проекционни методи (projection methods) от семейството на методите на Галеркин, или т.н. моментни методи. Методът, оригинална е предбожен от Ритц (Walter Ritz) през 1908 г., почти едновременно с метода на Rayleigh (1911). Методът на Ритц, познат още като енергетичен метод, е вариационна формулировка на енергията на системата, използваща за минимизация на функционала чрез апроксимиращи ортогонални функции. На тази база, по-късно се развиват методът на Бубнов (1911) и Галеркин (1915), по-късно методът на Петров-Галеркин (1940) и в съвременен вид Методът на Крайните ементи.

От друга страна, методите изброени по-горе, или по-точно моментните методи, принадлежат към семейството на методът с претеглени остатъци (weighted residuals method).

НЕЛИНЕЙНИ И АНОМАЛНИ ПРИЛОЖНИ ДИФУЗИОННИ МОДЕЛИ:

Приближени решения, анализ, синтез и примери

Част В

Основни резултати, приноси и след това

Таблица В1 Проекционни методи свързани с метода на интегралния баланс

Метод	Преди 2009				След 2009			
	Оптимизация	Локални производни	Нелокални производни	Нелинейни задачи	Оптимизация	Локални производни	Нелокални производни	Нелинейни задачи
Variational Formulation								
Ritz (1908) (energetic method) Rayleigh (1911)	да	да		да		да		да
(method of moments) Bubnov (1911-1913) Galerkin (1915) (Galerkin method of weighted residuals) Petrov- Galerkin (1940) Mihlin (1948) Finite element method	да	да		да	да	да		да
Не вариационна формулировка (Non-Variational Formulation) : Методи с нулев момент (Zero moment methods)								
Pohlhausen (1921)	не	да	не	да	NO	да	NO	да
Heat-balance integral Method (HBIM) Goodman (1959)	не	да	не	не	да	да	да	да
Refined Integral Method (RIM) Volkov and Li-Orlov (1970)	не	да	не	не	да	да	не	не
Double Integration Method (DIM) Hristov (2015)					да	да	да	да
Multiple Integration Method (MIM) Hristov (2017)					да	да	да	да

Още през 1911г. , Бубнов отбелязва, че уравненията получавани чрез метода на Ритц могат да бъдат получени без вариационна формулировка. Това дава началото на т.н. нулеви моментни методи. Като най важни примери от тях са:

- 1) **Метод на Pohlhausen (1921)** за граничен слой, използващ полином от 4-та степен,
- 2) **Метод на Goodman (1959)** (Heat-balance integral Method ,HBIM),
- 3) **Подобрен метод на Волков и Ли-Орлов (1970)** Refined Integral Method (RIM)

Всички тези нулеви моментни методи, не използват минимизация на функцията на грешката, една важна стъпка съществуваща в метода на Ритц и последващите развития на базата на метода на Галеркин.

В този ред, **Методът с Двойно Интегриране (DIM)** и **Методът Многократно Интегриране (MIM)** са нулеви моментни методи, но с последваща оптимизация. По-точно, интегралният метод дефинира структурата на приближеното решение, а последващото прилагане на метода на най-малките квадрати минимизира средноквадратичната грешка и доуточнява стойностите на параметрите на апроксимиращия профил. Освен това, **DIM и MIM са приложими и за случаи с нелокални производни**

1.2. Извод (синтез) на дифузионни модели на физични процеси с памет

В това направление мога да бъдат отбелязани средните основни резултати:

- Нов извод на уравнението на Ward-Tordai изцяло с апарата на класическото дробно смятане и формулиране на унифицирано уравнение за адсорбция на сърфактанти в условия на дифузионен контрол, както и неговия анализ за случаите на изотерми на Хенри и Фрьондлийх (**Глава 2.8**).
- Извод на уравнение за нестационарна топлопроводност с несингулярна експоненциална памет чрез конститутивно уравнение за топлинния поток използващо ядро на Jeffrey (**Глава 3.2**). Това е първото доказателство, че операторът на Капуто и Фабрицио възниква естествено след коректно дефиниране на конститутивни уравнения.
- Извод на уравнение с пространствена памет с несингулярно ядро и решения на нестационарната за топлопроводност (**Глава 3.3**). Извод (дефиниране) на пространствена производна (оператор) в смисъл на оператора на Капуто и Фабрицио (**Глава 3.3**).

Нов извод на уравнението на Додсън чрез конститутивно уравнение с експоненциална памет и възможност за фракционализация в смисъл на оператора на Капуто и Фабрицио (**Глава 3.4**).

- Конституиране на дифузионен модел с две експоненциални памети за едновременно действие на бързи и бавни релаксационни процеси, в смисъл на в смисъл на оператора на Капуто и Фабрицио (**Глава 3.4**)
- Важен момент при извода и анализа на тези нови модели е свързването на параметъра на дробния порядък с дифузионното число на Deborah при нестационарна дифузия (**Глава 3.4**) и параметъра на преразпределение (на стационарната и структурна топлинна дифузия) при стационарна топлопроводност с пространствена памет (**Глава 3.3**).

1.3. Анализ на дифузионни модели с нелокална и несингулярна памет

Използването на експоненциални несингулярни ядра на памет не е нов подход в науката, както беше показано в **Глава А3**. От гледна точка на предложения от Капуто и Фабрицио дробен интегрален оператор, представените изследвания бяха провокирани от огромния поток на статии с неговото формално приложение, които до голяма степен нямат физическа основа. Основната задача в тези изследвания, изброени в точка **1.2**, беше да се покаже физическата основа на използване на този нов оператор, а по-специално извеждане на дифузионни модели с експоненциална памет в конститутивните уравнения. Тези изследвания показаха, че дробният оператор предложен от Капуто и Фабрицио възниква естествено от баланса на маса (енергия) при прилагане на основния закон на линейна наследственост (уравнение на Болцман) и експоненциална памет (**Глава 3.2** и **Глава 3.4**).

Обобщение по въпроса с използване на дробния оператор на Капуто и Фабрицио е направено в

Hristov J., Fractional derivative with non-singular kernels: From the Caputo-Fabrizio definition and beyond: Appraising analysis with emphasis on diffusion models, Chapter 10, in *Frontiers in Fractional Calculus*, 2017, vol.1, S. Bhalekar, Ed., Bentham, Publ. 2017, pp.270-342.

Ядрото на това, първо по своя характер критично изследване, с ударение върху дифузионните модели, са изследванията показани в **Глави 3.2, 3.3 и 3.4**. Освен това, обърнато е внимание на въпроса с формалната фракционализация на дифузионното уравнение и възникващите въпроси и проблеми от такова механистично действие (**Глава 3.5**). С цел изясняване на въпроса, какъв тип памет се моделира с оператора на Капуто и Фабрицио, е направен анализ на релаксационната функция на Kohlrausch, нейното апроксимиране и асимптотично поведение (**Глава 3.6**).

Анализирани са примери на модели на реални физични процеси с експоненциална релаксационна функция (и интегрална форма), позволяваща лесно преминаване към оператора на Капуто и Фабрицио, като подкрепя за физичната основа на този оператор (**Глава 3.7**).

1.4. Получаване на приближени решения на практически важни задачи

Някои от тези резултати бяха отбелязани при представянето на резултатите от прилагането на DIM и MIM. Сред основните резултати, обобщени в това направление са

- Нови решения на нелинейното уравнение на Додсън чрез автомоделна променлива и приближено чрез DIM, съответно, а също така експериментите с формална фракционализация.

Това уравнение, във въведено полу-емпирично през 1973, до този момент нямаше автомоделно решение, а само решение в стил Carslaw and Jaeger (виж точка 1 на **Глава 3.3** и точка 1 на **Глава 4.1**). В глава 4.1 (по точно в съответната публикация) е направено първото точно автомоделно решение на уравнението на Додсън. Тези резултати провокираха изследвания в посока фракционализация на уравнението на Додсън от друга гледна точка и резултатите от **Глава 3.3** и **Глава 4.2** се потвърждават от

Roberto Garra, Andrea Giusti, Francesco Mainardi, The fractional Dodson diffusion equation: a new approach, *Ricerche di Matematica*, 2018,1-11; DOI: 10.1007/s11587-018-0354-3;

В това изследване, публикувано през **Януари 2018 г.**, се потвърждава оригиналността на извода на дробната версия на уравнението на Додсън (**Глава 3.3**). Освен това, точното автомоделно решение (**Глава 4.1**) се оказва частен на решението дробното уравнение, когато дробният порядък стане равен на 1.

- Друг основен резултат от решението на практически ориентирани задачи е решението на моделите на Mullins: 1) в **Глава 1.7** за случая на механизъм на изпарение кондензация, чрез използване на DIM; 2) в случай на механизъм на повърхностна дифузия чрез MIM (**Глава 1.6**) и 3) субдифузионната му версия в случай на механизъм на повърхностна дифузия чрез MIM (**Глава 4.4**).
- В допълнение техниката на DIM позволява решения на нелинейното радиационно дифузионно уравнение (**Глава 4.5**)
- Най-накрая, трябва да отбележим изследването представено в **Глава 4.6**, където DIM е използван за решение на нелинейно дифузионно уравнение с квадратична нелинейност на

Fujita, свързано с дифузионно контролиран адсорбция. Всъщност дифузионно уравнение с нелинейност тип нелинейност тип Fujita е и трансформирано уравнение на Mullins (Глава 1.7).

2. ОСНОВНИ ПРИНОСИ

Казано общо, резултатите от изследванията представени в тази дисертация са преди всичко относно решаване на практически важни дифузионни нелинейни аномални модели. В тази връзка, след анализа на резултатите направен в предхождащата точка, приносите могат да формулират както следва:

2.1. Научни приноси:

2.1.1. Разширяване на областта на приложение на интегралния метод към получаване на приближени решения в затворена форма, на нелинейни дифузионни уравнения с локални и нелокални производни (със сингулярни ядра) в случай на бавна (степенна зависимост на дифузионния коефициент) и бърза дифузия (с нелинейности на Fujita).

2.1.2. Създадена е модификация на метода с двойно интегриране (DIM), позволяваща използване на метода при решения на модели с локални и нелокални производни по време.

2.1.3. Предложен е метод с многократно интегриране (MIM) позволяващ прилагането му към дифузионни уравнения от висок ред. Класическият метод на Гудман и DIM са частни случаи на MIM.

2.1.4. Направен е нов извод на уравнението Ward-Tordai и е формулирано унифицирано подробно уравнение от порядък $1/2$ моделиращо адсорбцията на сърфактанти под дифузионен контрол.

2.1.5. Направен е извод на дифузионни модели с несингулярна памет, в духа на оператора на Капуто и Фабрицио, чрез конститутивни уравнения с експоненциална памет.

2.1.6. Направен е нов извод на уравнението на Додсън за дифузия в твърди тела от позицията на конститутивни уравнения с експоненциална памет и е формулиран модел с две експоненциални ядра.

2.2. Научно-приложни приноси

2.2.1. Получени с нови интегрални решения на важни практически дифузионни модели с различни нелинейности на дифузионния коефициент: i) степенна и потенциално степенна зависимост в случай на топлопроводност ii) с нелинейности на Fujita

2.2.2. Решени са ефективно с удобни за използване приближени решения на уравнението на Mullins в три версии и на уравнението на дифузионно контролирана адсорбция с правоъгълна изотерма

2.2.3. Решени са ефективно нелинейното радиационно уравнение и уравнението на Додсън (точно и приближено).

3. А СЛЕД ТОВА?. Някои бележки чертаещи бъдещи изследвания

Получените резултати и някои предварителни изследвания позволяват да бъдат формулирани няколко основни направления за бъдещи изследвания:

- Използване на метода с двойно интегриране (DIM) към нови нелинейни дифузионни модели с нелинеен характер
- Разширяване на областта на приложение на метода с многократно интегриране (MIM) както към модели от цял порядък, така и към модели с дробни оператори
- Изследване на възможностите за формулиране на известни нелинейни модели на преносни процеси в термини на интегрални оператори с несингулярна памет.
- Изследване възможностите за формулиране на модели на нелинейни релаксационни процеси с функции на памет различни от използваните до сега. Прегледът в **Глава А3** и развитието на новите материали дават широка база за такова развитие.
- Моделиране и решение на практически важни нелинейни процеси с дифузионен характер. Проблемите възникващи в областта на корозията повърхностната дифузия, разпространението на замърсители в нелинейни среди, топлопроводност в нови материали, реология на практически важни сложни флуиди, даже и класическите процеси на масопренос в инженерната химия, формират широка област за приложение на постигнатите резултати и развитие на идеите възникнали от тях.

НЕЛИНЕЙНИ И АНОМАЛНИ ПРИЛОЖНИ ДИФУЗИОННИ МОДЕЛИ:

Приближени решения, анализ, синтез и примери

Част В

Основни резултати, приноси и след това
