

Московский авиационный институт
(национальный исследовательский университет)

На правах рукописи

Сластушенский Юрий Викторович

УДК 519.63

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
АНОМАЛЬНОЙ ДИФФУЗИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ
ДРОБНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ И
ДИСКРЕТНО-ЭЛЕМЕНТНЫХ МОДЕЛЕЙ**

Специальность: 05.13.18 – Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук,
профессор
Ревизников Дмитрий Леонидович

Москва – 2013

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
1. ДРОБНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ К МОДЕЛИРОВАНИЮ АНОМАЛЬНОЙ ДИФФУЗИИ	21
1.1. МАКРОСКОПИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ АНОМАЛЬНОЙ ДИФФУЗИИ	21
1.2. КОНЕЧНО-РАЗНОСТНЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ДРОБНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ	24
1.3. МЕТОДЫ ПОВЫШЕННОГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ.....	26
1.4. МЕТОД СЛУЧАЙНОГО БЛУЖДЕНИЯ	31
1.5. ОСОБЕННОСТИ РЕШЕНИЙ ДРОБНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ	36
Выводы к главе 1.....	40
2. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АНОМАЛЬНОЙ ДИФФУЗИИ БИЛЬЯРДНОГО ГАЗА В ПОЛИГОНАЛЬНОМ КАНАЛЕ.....	42
2.1. ДИСКРЕТНО-ЭЛЕМЕНТНАЯ МОДЕЛЬ БИЛЬЯРДНОГО ГАЗА	42
2.2. РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА	44
2.3. ОПИСАНИЕ АНОМАЛЬНОЙ ДИФФУЗИИ БИЛЬЯРДНОГО ГАЗА ДРОБНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫМИ УРАВНЕНИЯМИ.....	47
Выводы к главе 2.....	58
3. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АНОМАЛЬНОЙ ДИФФУЗИИ В СРЕДАХ С НЕОДНОРОДНОЙ СТРУКТУРОЙ	59
3.1. ДИСКРЕТНО-ЭЛЕМЕНТНАЯ МОДЕЛЬ СРЕДЫ С НЕОДНОРОДНОЙ СТРУКТУРОЙ.....	59
3.2. ОСОБЕННОСТИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА	63
3.3. МЕХАНИЗМЫ ПОЯВЛЕНИЯ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ АНОМАЛИИ	67
3.4. МЕХАНИЗМЫ ПОЯВЛЕНИЯ ВРЕМЕННОЙ АНОМАЛИИ	77
3.5. МЕХАНИЗМЫ ПОЯВЛЕНИЯ КОМБИНИРОВАННОЙ АНОМАЛИИ	81
3.6. МОДЕЛИРОВАНИЕ АНОМАЛЬНОЙ ДИФФУЗИИ ВДОЛЬ ГРАНИЦ ЗЁРЕН.....	84
3.7. ОПИСАНИЕ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА	89
Выводы к главе 3.....	93
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	94
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	96

ВВЕДЕНИЕ

В настоящей работе рассматриваются вопросы математического описания процессов одномерной аномальной диффузии. В отличие от классической диффузии, характеризующейся линейной зависимостью среднего квадрата смещения частиц от времени, в аномальных процессах наблюдается отклонение от линейного закона и появление дробного показателя степени p , $\langle r^2 \rangle \sim t^p$. При этом возможны режимы супердиффузии ($1 < p < 2$) и субдиффузии ($0 < p < 1$), которые связаны соответственно с прыжковым механизмом переноса и наличием ловушек в среде.

В работе рассмотрены два подхода к описанию аномальной диффузии – макроскопический, основанный на использовании дробно-дифференциальных уравнений, и микроскопический, предполагающий прямое моделирование динамики частиц и столкновительных процессов в системе. Исследованы механизмы появления аномальных эффектов как по пространству, так и по времени, показана эквивалентность обоих подходов к описанию рассматриваемых явлений.

В данном разделе дан краткий обзор дробно-дифференциального исчисления, позволяющего описывать явления аномальной диффузии в приближении сплошной среды.

Дробно-дифференциальное исчисление – это область математического анализа, посвящённая исследованию и применению производных и интегралов произвольного (вещественного и комплексного) порядка. Дробно-дифференциальное исчисление (или просто дробное исчисление) имеет давнюю историю. Мысль об обобщении понятия дифференцирования $\frac{\partial^n f(x)}{\partial x^n}$ на нецелые значения n возникала с самого зарождения дифференциального исчисления. Первая зафиксированная попытка обсуждения такой идеи содержится в переписке Г. Лейбница и Г. Лопиталья 1695 г., поэтому историю идеи о производных дробного порядка принято отсчитывать от знаменитого письма Лопиталья Лейбницу с вопросом о том, что может представлять собой

производная порядка $\frac{1}{2}$, и ответного письма Лейбница, содержащего пророческие слова «...из этого парадокса со временем будут выведены полезные следствия». Идеи, связанные с дробным интегро-дифференцированием, разрабатывались Л. Эйлером (1730), П.-С. Лапласом (1812), Ж. Б. Ж. Фурье (1822), Н. Х. Абелем (1823–1826). В 1832–1837 гг. появилась серия работ Ж. Лиувилля, сделавших его по праву создателем уже достаточно полноценной теории дробного исчисления. Серьёзный вклад в развитие теории внесли работы Б. Римана (1847), Х. Хольмгрена (1865–1867), А. К. Грюнвальда (1867–1872) и А. В. Летникова (1868–1872). Также следует отметить вклад таких учёных, как Ж. Адамар (1892), Г. Вейль (1917), П. Леви (1923), М. Риес (1949) и В. Феллер (1952). В результате, к середине 20 века вышло уже множество работ, так или иначе связанных с дробным исчислением, но результаты большинства этих работ были труднодоступны и малоизвестны. Зачастую затрачивались большие усилия для получения утверждений или уже известных, или легко вытекающих из известных. Первая монография, содержательно отражающая достижения теории дробного исчисления, вышла только в 1974 г. В этом же году в Нью-Хейвене прошла организованная Б. Россом первая международная конференция, посвященная именно вопросам дробного интегро-дифференцирования.

Среди русскоязычной литературы первой обстоятельной работой, посвящённой математике дробно-дифференциального исчисления, была книга [1]. На сегодняшний день вышло уже большое количество работ, которые посвящены не только непосредственно теории дробного исчисления, но и её применению в самых различных областях науки, техники и естествознания, например [2-17]. Среди англоязычных публикаций следует отметить большой вклад, которые внесли в теорию Meerschaert M.M. и его соавторы [18-30]. Не менее полезна и серия работ Gorenflo R. и Mainardi F. [31-35]. Также важны статьи за авторством Sokolov I.M., Chechkin A.V., Klafter J. и соавторов [36-44], Liu F., Anh V. и соавторов [45-49], Roop J.P. [50-52]. Кроме того, стоит выделить труды от Momani S., Odibat Z. [53-56] и Hristov J. [57-62]. Другие

важные публикации представлены в [63-75]. Следует отметить, что в последние годы интерес к дробно-дифференциальному исчислению особо стимулируется теми практическими его приложениями, которые регулярно обнаруживаются в различных физических экспериментах.

Далее отметим самое существенное из этих работ.

На данный момент известно несколько альтернативных определений дробных интегралов и производных (Адамар, Вейль, Маршо и др.), но наиболее распространёнными являются определения Римана и Лиувилля.

Идея определения дробной производной по Риману-Лиувиллю заключается в обобщении формулы Коши для n -кратного интеграла:

$$\int_a^x \int_a^{x_{n-1}} \dots \int_a^{x_1} f(x_0) dx_0 \dots dx_{n-1} = \frac{1}{(n-1)!} \int_a^x (x-t)^{n-1} f(t) dt \quad (1)$$

на дробный порядок n .

В настоящее время определение дробного интеграла согласно Риману-Лиувиллю представляется следующими выражениями:

$$I_{a+}^{\nu} f(x) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_a^x (x-t)^{\nu-1} f(t) dt, \quad (2)$$

$$I_{b-}^{\nu} f(x) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_x^b (t-x)^{\nu-1} f(t) dt, \quad (3)$$

где $\nu > 0$, $\Gamma(\nu)$ – гамма-функция Эйлера.

Первый из них называется левосторонним, а второй – правосторонним. Эти интегралы определены на интегрируемых по Лебегу функциях на интервале $(a;b)$ и существуют почти всюду.

Дробные интегралы Римана-Лиувилля удовлетворяют полугрупповому свойству:

$$I_{a+}^{\alpha} I_{a+}^{\beta} \phi = I_{a+}^{\alpha+\beta} \phi, \quad I_{b-}^{\alpha} I_{b-}^{\beta} \phi = I_{b-}^{\alpha+\beta} \phi, \quad \alpha > 0, \beta > 0.$$

Просто продолжить дробные интегралы на область отрицательных значений ν , т.е. определить дробные производные простым изменением знака

порядка невозможно, т.к. при положительных ν интеграл $\int_a^x (x-t)^{-\nu-1} f(t)dt$ расходится на верхнем пределе.

Преодолевается эта трудность использованием соотношения:

$$D_a^\nu f(x) = D^m I_a^{m-\nu} f(x).$$

Таким образом, теперь применение дифференциального оператора \mathbf{D}^m к дробному интегралу \mathbf{I}^ν позволяет ввести дробное дифференцирование как операцию, обратную дробному интегрированию:

$$D_{a+}^\nu f(x) = D^m I_{a+}^{m-\nu} f(x) = \frac{1}{\Gamma(m-\nu)} \frac{d^m}{dx^m} \int_a^x \frac{f(t)dt}{(x-t)^{\nu-m+1}}, \quad (4)$$

$$D_{b-}^\nu f(x) = (-D)^m I_{b-}^{m-\nu} f(x) = \frac{1}{\Gamma(m-\nu)} \frac{d^m}{d(-x)^m} \int_x^b \frac{f(t)dt}{(t-x)^{\nu-m+1}}. \quad (5)$$

Дробные производные Римана-Лиувилля положительного порядка ν определены в классе функций $[\nu]-1$ раз абсолютно дифференцируемых на отрезке $[a;b]$ и существуют почти всюду.

В итоге (положив $m=[\nu]+1$, т.е. взяв наименьшее из таких чисел) односторонние дробные производные Римана-Лиувилля произвольного порядка ν определяются формулами:

$$\frac{\partial_+^\nu f(x)}{\partial x^\nu} = \frac{1}{\Gamma([\nu]+1-\nu)} \frac{d^{[\nu]+1}}{dx^{[\nu]+1}} \int_a^x (x-t)^{[\nu]-\nu} f(t)dt, \quad (6)$$

$$\frac{\partial_-^\nu f(x)}{\partial x^\nu} = \frac{(-1)^{[\nu]+1}}{\Gamma([\nu]+1-\nu)} \frac{d^{[\nu]+1}}{dx^{[\nu]+1}} \int_x^b (t-x)^{[\nu]-\nu} f(t)dt, \quad (7)$$

для левосторонней и правосторонней производных.

Если ν – целое число, то эти формулы дробных производных совпадают с формулами обычной производной целого порядка.

При $a = 0$ и $b = 0$ данные формулы называются так же дробной производной Римана-Лиувилля, при других конечных a и b – просто дробной производной Римана, а при $a = -\infty$ для левосторонней и $b = +\infty$ для правосторонней – дробной производной Лиувилля и Вейля соответственно.

Дробные производные сохраняют ряд свойств обычных производных.

1) Они обладают свойством линейности:

$$D_a^\nu(c_1 f_1(t) + c_2 f_2(t)) = c_1 D_a^\nu f_1(t) + c_2 D_a^\nu f_2(t).$$

2) Они обладают свойством ν -однородности:

$$D_a^\nu f(bt + c) = b^{-\nu} D_{ab+c}^\nu f(bt + c), b > 0.$$

3) Они являются левыми обратными операциями по отношению к дробному интегрированию:

$$D_a^\nu I_a^\nu f(t) = D_a^\nu D_a^{-\nu} f(t) = f(t), \nu > 0.$$

Однако иной порядок применения этих же операторов даёт другой результат:

$$I_a^\nu D_a^\nu f(t) = D_a^{-\nu} D_a^\nu f(t) = f(t) - \sum_{j=1}^{[\nu]+1} f_a^{\nu-j}(a+) \frac{(x-a)^{\nu-j}}{\Gamma(\nu-j)}, \nu > 0,$$

что обобщает формулу Ньютона-Лейбница.

В то же время у них появляются специфические свойства.

В первую очередь, это зависимость от предела a (нелокальность), т.к. дробная производная является нелокальным оператором свёртки. В результате, значение левосторонней дробной производной функции $f(x)$ в точке x зависит от значений функции во всех точках левее x , а для правосторонней – от значений функции во всех точках правее x .

Таблица производных также меняет вид, хотя формула дифференцирования степенной функции остаётся той же самой, только целое n заменяется дробным ν .

$$\text{Пусть } \Phi_\mu(t) = \frac{1}{\Gamma(\mu)} t^{\mu-1}, t > 0.$$

Тогда:

$$D_a^\nu \Phi_\mu(t-a) = \frac{1}{\Gamma(\mu)} D_a^\nu (t-a)^{\mu-1} = \frac{1}{\Gamma(\mu-\nu)} (t-a)^{\mu-1-\nu} = \Phi_{\mu-\nu}(t-a).$$

Отсюда следуют два необычных факта.

Во-первых, дробная производная положительного порядка $\nu > 0$ от постоянной C не равна нулю (при $a \neq -\infty$):

$$D_a^\nu C = \frac{1}{\Gamma(1-\nu)} C(t-a)^{-\nu}.$$

Во-вторых, ν -я производная функции $C\Phi_\nu$ равна нулю:

$$D_a^\nu C\Phi_\nu(t-a) = 0.$$

Следовательно, функция $C\Phi_\nu$ играет роль постоянной для ν -й производной. И если, например, функция $g(x)$ является решением уравнения $D_a^\nu g(t) = f(t)$, то и функция $g(x) + C\Phi_\nu(x-a)$ будет его решением, а вот функция $g(x) + C$ – нет.

Иногда в качестве дробной производной используется обратная конструкция: вначале осуществляется m -кратное дифференцирование, а затем – дробное интегрирование:

$$D_a^\nu f(x) = I_a^{m-\nu} D^m f(x).$$

Такие операции называются дробными производными Капуто, по имени итальянского математика, использовавшего их для решения некоторых задач теории упругости. В общем случае дробные производные Римана-Лиувилля и Капуто не совпадают, но на множестве функций, удовлетворяющих условию $f_a^{(j)}(a+) = 0, 0 \leq j \leq [\nu]$, разница исчезает. Одно из достоинств производных по Капуто – равенство нулю производной от константы:

$$D_a^\nu C(t-a) = 0, \nu > 0.$$

В 1867 г. Грюнвальд и в 1868 г. Летников выпустили работы, в которых они развили подход к дробному интегро-дифференцированию, основанный на конечно-разностных отношениях. Его идея в том, что производную целого порядка n ($n = 1, 2, 3, \dots$), первоначально введённую как результат n -кратного дифференцирования, можно представить также как предел отношения приращения (разности) функции n -го порядка Δu к n -й степени приращения аргумента h^n . Таким образом, Грюнвальд и Летников использовали абсолютно другой подход. Они определили производную дробного порядка, обобщив формулу:

$$f^{(n)}(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\Delta_h^n f(x)}{h^n}, \quad \Delta_h^n f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \binom{n}{k} f(x - kh), \quad \binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!}, \quad (8)$$

где $\Delta_h^n f(x)$ – конечная разность порядка n с шагом h , на случай нецелых n .

В случае нецелых n конечная разность определяется следующим выражением:

$$\Delta_h^\nu f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \binom{\nu}{k} f(x - kh), \quad (9)$$

где биномиальные коэффициенты определяются как:

$$\binom{\nu}{k} = \frac{\nu(\nu-1)\dots(\nu-k+1)}{k!} = \frac{\Gamma(\nu+1)}{\Gamma(k+1)\Gamma(\nu-k+1)}. \quad (10)$$

Таким образом, дробная производная Грюнвальда-Летникова будет определяться выражением:

$$f_{\pm}^{(\nu)}(x) = \lim_{h \rightarrow +0} \frac{\Delta_{\pm h}^\nu f(x)}{h^\nu}, \quad (11)$$

которое существует для непрерывных функций.

Этот подход, предложенный Грюнвальдом и Летниковым уже относительно давно, в последнее время вновь привлек к себе внимание с точки зрения удобства в приближённых вычислениях.

Выражения (9) – (11) можно рассматривать как обобщение известных выражений для целых порядков производной. Проще говоря, первая производная функции $f(x)$ может быть приближена конечной разностью назад на сетке с шагом h как

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x} \approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h},$$

вторая производная – как

$$\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} \approx \frac{f(x) - 2f(x-h) + f(x-2h)}{h^2},$$

а производная порядка n – как

$$\frac{\partial^n f(x)}{\partial x^n} \approx \frac{1}{h^n} \sum_{k=0}^n (-1)^k \frac{n!}{k!(n-k)!} f(x - kh).$$

Учитывая, что $n! = \Gamma(n+1)$, и обобщая на случай нецелых n , в итоге, Летников доказал [4], что для интегрируемых по Лебегу функциях $f(x)$ дробная производная произвольного порядка ν , задаваемая формулами:

$$\frac{\partial_+^\nu f(x)}{\partial x^\nu} = \frac{1}{\Gamma(-\nu)} \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\nu} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(k-\nu)}{\Gamma(k+1)} f(x - kh), \quad (12)$$

для левосторонней дробной производной, и

$$\frac{\partial_-^\nu f(x)}{\partial x^\nu} = \frac{1}{\Gamma(-\nu)} \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\nu} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(k-\nu)}{\Gamma(k+1)} f(x+kh), \quad (13)$$

для правосторонней дробной производной (в случае аппроксимации производной разностью вперёд), совпадает с определениями дробной производной Лиувилля и Вейля.

Эти формулы положены в основу большинства современных вычислительных алгоритмов решения дробно-дифференциальных уравнений.

Отдельно стоит сказать об определении дробных производных по Маршо, которые могут быть получены регуляризацией выражений (2) – (3), расходящихся при отрицательных ν , путём выделения из этих выражений конечной части в смысле Адамара и последующей записи получившихся выражений через конечные разности:

$$D_{\pm}^\nu f(x) = \frac{(\pm 1)^{[\nu]}}{\Gamma(-\nu)A_m(\nu)} \int_0^\infty \frac{\Delta_{\pm t}^m f(x)}{t^{1+\nu}} dt, \quad m > \nu > 0,$$

где $A_m(\nu) = \sum_{k=1}^m (-1)^k \binom{m}{k} k^\nu$, $\nu > 0$ – нормировочные постоянные.

Можно показать, что в классе достаточно «хороших» функций дробные производные Маршо и дробные интегралы Римана-Лиувилля (при $a = 0$ и $b = 0$) являются взаимно обратными операторами.

Производная Маршо от постоянной функции равна нулю.

Последнее определение производной дробного порядка, о котором стоит упомянуть, разработано Вейлем и приспособлено для периодических функций [3]. Идеи, положенные в основу этого определения, сводятся к тому, чтобы операция дробного интегро-дифференцирования переводила периодические функции вида

$$f(x) \sim \sum_{k=-\infty}^{\infty} f_k e^{ikx}, \quad f_k = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-ikx} f(x) dx$$

в периодические с тем же периодом:

$$I_{\pm}^{(\nu)} f \sim \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{f_k}{(\pm ik)^\nu} e^{ikx}, \quad D_{\pm}^\nu f \sim \sum_{k=-\infty}^{\infty} (\pm ik)^\nu f_k e^{ikx}.$$

На основании таких положений определение Вейля дробного интеграла сводится к следующему выражению:

$$I_{\pm}^{(\nu)} f = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(x-t) \Psi_{\pm}^{\nu}(t) dt,$$

$$\text{где } \Psi_{\pm}^{\nu}(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikt}}{(\pm ik)^{\nu}} = 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\cos\left(kt \mp \frac{\nu\pi}{2}\right)}{k^{\nu}}.$$

Операция дробного дифференцирования по Вейлю определяется как обратная к дробному интегрированию и сводится к выражению:

$$D_{\pm}^{\nu} f(x) = \pm \frac{d}{dx} I_{\pm}^{(1-\nu)} f(x),$$

которое можно было бы назвать дробной производной Вейля-Лиувилля в сравнении с выражением:

$$D_{\pm}^{\nu} f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} [f(x-t) - f(x)] \frac{d}{dt} \Psi_{\pm}^{1-\nu}(t) dt,$$

которое можно было бы назвать дробной производной Вейля-Маршо.

Эти два определения совпадают на функциях, удовлетворяющих условию Гёльдера порядка $\lambda > \nu$ на отрезке $[0; 2\pi]$.

В заключение стоит отметить, что существует несколько определений дробной производной, полученных с различных точек зрения, имеющих разные области определения и, вообще говоря, не всегда совпадающих.

В частности [3]:

1) Производная Грюнвальда-Летникова совпадает с производной Маршо на функциях, измеримых на оси и удовлетворяющих условию:

$$\int_{\mathbb{R}^1} |f(x)|^p dx < \infty, \text{ где } 1 \leq p < \infty.$$

2) Дробная производная Вейля-Лиувилля совпадает с дробной производной Римана-Лиувилля, если:

$$\int_0^{2\pi} f(t) dt = 0.$$

3) Дробная производная Вейля-Маршо совпадает с дробной производной Маршо для 2π -периодических функций.

4) Производная Римана-Лиувилля и производная Маршо совпадают на функциях, представимых дробным интегралом Римана-Лиувилля $f = I_{a+}^{\nu} \varphi$ от измеримой функции, удовлетворяющей условию:

$$\int_a^b |f(x)| dx < \infty.$$

С самого зарождения интегро-дифференциального исчисления важнейшую роль играли геометрическая и физическая интерпретации производных (тангенс угла наклона касательной и скорость точки с координатой $x = f(t)$) и интегралов (площадь криволинейной трапеции и координата точки или работа силы).

В силу рекуррентного характера операций высших целых порядков n эти интерпретации несложно распространить на произвольные n , получив конструкции типа «тангенс угла наклона тангенса угла наклона», но наглядность при этом исчезает. Дело поправляется введением понятий «выпуклость», «вогнутость», «кривизна», «ускорение», но в целом это проблемы не решает.

Проблема интерпретации дробных операторов существует более 300 лет, т.е. столько же, сколько сами операторы, и неоднократно формулировалась как нерешённая задача. В последние годы интерес к этой проблеме усилился, однако в поисках смысла дробных производных несколько упускается из виду, что эта проблема не решена ещё для целых порядков, т.е. нельзя одной общей фразой дать интерпретацию оператору \mathbf{D}^n , справедливую для всех целых n — для каждого значения n приходится давать собственную интерпретацию.

Тем не менее, существуют наиболее распространённые подходы к этой задаче [72]. Возможность интерпретации дробных операторов даёт запись левостороннего интеграла Римана-Лиувилля в виде интеграла Стилтеса:

$$I_0^{\nu} f(\tau) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^{\tau} (\tau - t)^{\nu-1} f(t) dt = \int_0^{\tau} f(t) dg_{\tau}(t),$$

где $g_{\tau}(t) = \frac{1}{\Gamma(\nu+1)} [\tau^{\nu} - (\tau - t)^{\nu}]$.

Тогда, например, механическая интерпретация дробного интеграла выглядит как определение длины пройденного пути при движении с переменной скоростью $V = f(t)$, вычисляемой по собственным часам, показания которых связаны с истинным временем t_{ucm} как $t_{ucm} = g(t)$. Таким образом, пройденный путь будет выражаться дробным интегралом $L = I_0^\nu f(\tau)$.

Производная же от этого выражения по времени τ , равная скорости движения U в момент $t = \tau$, вычисленной по времени движущегося (действительный путь в единицу собственного времени) и есть производная дробного порядка $1-\nu$ от истинной скорости $V(\tau)$:

$$U(\tau) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \frac{d}{d\tau} \int_0^\tau (\tau - t)^{\nu-1} f(t) dt.$$

Если же собственные часы идут как истинные, то V станет равным единице, и обе скорости совпадут: $U(\tau) = f(\tau)$.

Первой прикладной задачей теории дробного исчисления считается задача о таутохроне, рассмотренная Абе́лем в 1823 г. Другие приложения теории дробного интегро-дифференцирования были даны Лиувиллем в 1832 г. к задачам геометрии, физики, механики (задача Лапласа о влиянии бесконечного прямолинейного проводника на магнит, задача Гаусса о приближенных квадратурах и др. [1]).

Иногда дробные производные вводят в исходные уравнения, с которых начинаются исследования. Например, закон Гука $\sigma(t) = C\varepsilon(t)$ (напряжение пропорционально деформации) и закон Ньютона для вязкой жидкости $\sigma(t) = C \frac{d}{dt} \varepsilon(t)$ остроумно обобщаются на случай вязкоупругой среды (т.е. для вязкоупругих материалов, занимающих промежуточное положение между упругим телом и вязкой жидкостью, например, полимеров) как $\sigma(t) = C \frac{d^\nu}{dx^\nu} \varepsilon(t)$, где $0 \leq \nu \leq 1$ – порядок дробной производной, с которым можно проходить все промежуточные режимы вязкоупругости. Несмотря на то, что эта зависимость – своего рода интерполяция между двумя моделями процессов, дробно-

дифференциальный закон вязкоупругости имеет все права на существование и подтверждён многочисленными экспериментами, самые ранние из которых относятся к 1921 г.

Другой пример – дробно-дифференциальный осциллятор, выраженный уравнением:

$$[D^2 + aD_0^\nu + b]x(t) = f(t), \quad a > 0, b > 0, 0 < \nu < 2.$$

Уравнение описывает движение осциллятора, находящегося под действием упругой силы и силы трения дробного типа, характерной для вязкоупругих сред. При $a^2 - 4b > 0, \nu \neq 1$ классическое экспоненциальное затухание дополняется более медленной компонентой степенного типа, порождаемой дробной производной. При $a^2 - 4b < 0$ в классическом случае имеют место колебания с убывающей по экспоненциальному закону амплитудой. В случае же осциллятора дробного типа доминирование степенной асимптотики на больших временах приводит к тому, что решение перестаёт быть знакопеременным: осциллятор совершает только конечное число колебаний, после чего монотонно приближается к точке равновесия $x = 0$, справа, если $\nu < 1$, или слева, если наоборот.

На текущий момент известны приложения теории дробного исчисления к задачам из самых различных отраслей науки, таких как химическая физика, биология, гидрология, теория случайных процессов, теория гравитации и даже математическая экономика [34]. Элементы дробного исчисления появляются при моделировании систем с памятью, в описании процессов, происходящих в средах с фрактальной геометрией [12], и во многих других задачах.

Одной из самых актуальных областей приложения дробно-дифференциального исчисления сегодня являются процессы аномальной диффузии, которые в последнее время вызывают всё больший интерес у исследователей в связи с обнаружением аномальных свойств у ряда наноматериалов и наносистем (наноканалы, нанотрубки, нанонити и т.д.). Действительно, многочисленными экспериментами было показано, что такие материалы обладают уникальными теплофизическими свойствами, которые

описываются моделью аномальной диффузии. Подробную информацию об экспериментальном обнаружении аномальных свойств у самых разнообразных физических процессов можно найти в [76-95].

Закономерно, что процессы аномальной диффузии в последнее время вызывают всё больший интерес у исследователей. В настоящее время ведутся интенсивные исследования по созданию на основе подобных нанообъектов новых материалов с уникальными эксплуатационными свойствами. Таким образом, разработка методов и алгоритмов математического моделирования рассматриваемых процессов создает теоретическую основу для изучения свойств материалов нового поколения и возможностей их применения.

Настоящая работа посвящена численному моделированию процессов аномальной диффузии. Рассмотрен комплекс вычислительных экспериментов, связанных с моделированием процессов диффузии в сложно структурированных средах, среди которых – диффузия бильярдного газа в полигональном канале и диффузия в средах с неоднородной структурой. Была представлена математическая модель одномерной аномальной диффузии, были разработаны эффективные алгоритмы моделирования пространственно-временной эволюции частиц в этих средах. По результатам исследования характеристик смоделированных диффузионных процессов было проведено сопряжение конечно-элементных моделей с решениями соответствующих дробно-дифференциальных уравнений.

Актуальность темы.

Диссертационная работа направлена на создание аппарата математического моделирования процессов аномальной диффузии. В отличие от классической диффузии, характеризующейся линейной зависимостью среднего квадрата смещения частиц от времени, в аномальных процессах наблюдается отклонение от линейного закона и появление дробного показателя степени. Такая ситуация характерна для сложно структурированных неоднородных сред, когда существенными становятся эффекты долгосрочной

памяти и/или пространственной нелокальности. В качестве примеров систем, в которых наблюдается корреляция или когерентность движения частиц, можно привести пористые среды, среды с фрактальной структурой, аморфные полупроводники, аэрогели и т.д. Рассматриваемый класс процессов вызывает всё больший интерес у исследователей в связи с обнаружением аномальных свойств у ряда наноматериалов и наносистем. Разработка эффективных средств компьютерного моделирования является важнейшей составляющей научной деятельности в этом новом междисциплинарном направлении.

Целью работы является создание методов и средств математического моделирования аномальной диффузии в сложно структурированных средах. Для этого необходимо решение следующей группы задач:

- Анализ подходов к моделированию аномальной диффузии в средах с различной структурой.
- Разработка и реализация алгоритмов численного решения дробно-дифференциальных уравнений.
- Разработка и реализация алгоритмов дискретно-элементного моделирования процессов аномальной диффузии.
- Проведение вычислительного эксперимента по моделированию диффузионных процессов в полигональных каналах и неоднородных средах. Анализ типа и характеристик диффузии.
- Разработка методов согласования микро- и макромасштабного описания процессов аномальной диффузии.

Научная новизна.

Исследованы вопросы моделирования аномальной диффузии на микроуровне с использованием метода дискретных элементов и на макроуровне с помощью методов дробно-дифференциального исчисления. Предложен алгоритм определения параметров макроскопической модели по данным микромасштабного моделирования. Тем самым установлена связь между различными масштабами в описании аномальной диффузии.

Разработаны эффективные вычислительные алгоритмы решения дифференциальных уравнений с дробными производными. Отличительной чертой построенных конечно-разностных схем является повышенный порядок аппроксимации, что обеспечивает достаточно высокую точность при относительно низких вычислительных затратах. Предложена эффективная реализация метода случайного блуждания, учитывающая наличие временной аномалии и конвекции, обоснована корректность предлагаемого метода.

Проведено численное моделирование пространственно-временной эволюции частиц в полигональных каналах, исследованы возникающие диффузионные процессы, на основе вычислительных экспериментов показано влияние профиля канала на характеристики установившейся диффузии. Выявлены механизмы возникновения комбинированного типа аномальной диффузии.

Проведено численное моделирование пространственно-временной эволюции частиц в средах с неоднородной структурой, исследовано влияние микромасштабных параметров среды на характеристики и тип установившейся диффузии. Выделены различные виды аномалий: пространственная, временная и комбинированная, определены условия их возникновения.

Достоверность и обоснованность.

Достоверность и обоснованность результатов, полученных в ходе диссертационного исследования, обеспечивается сопоставлением между собой численных и аналитических решений тестовых задач, численных решений, полученных независимыми друг от друга способами, а также хорошей согласованностью результатов проведённых вычислительных экспериментов с использованием дискретно-элементных моделей и решений дробно-дифференциальных уравнений.

Практическая ценность.

Разработанные в диссертации средства математического моделирования имеют высокую значимость с точки зрения перспектив их применения для исследования диффузионных процессов в сложно структурированных средах.

При этом создаётся теоретическая основа для исследования свойств и создания конструкционных (в том числе – нанокompозитных) и теплозащитных материалов нового поколения, предназначенных для использования в авиационно-космической технике. Разработанные вычислительные алгоритмы обладают высоким потенциалом к распараллеливанию вычислений и представляют значительный интерес для специалистов в области математического моделирования. Результаты диссертационного исследования могут быть использованы и при составлении образовательных курсов по математическому моделированию и численным методам.

Апробация работы.

Материалы диссертации докладывались и обсуждались на следующих российских и международных форумах:

- VI Всероссийская научная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Технологии Microsoft в теории и практике программирования», 1-2 апреля 2009 г., Москва.
- VIII Международная конференция по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ`2010), 25-31 мая 2010 г., Алушта.
- XVII Международная конференция по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСПСС`2011), 25-31 мая 2011 г., Алушта.
- Московская молодёжная научно-практическая конференция «Инновации в авиации и космонавтике – 2012», 17-20 апреля 2012 г., Москва.
- IX Международная конференция по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ`2012), 25-31 мая 2012 г., Алушта.

Публикации.

По теме диссертации опубликовано 7 работ [96-102], из них 2 статьи в научных журналах из перечня ВАК РФ для представления основных научных результатов диссертаций на соискание учёных степеней доктора и кандидата наук. Одна статья [103] принята к публикации.

Структура и содержание работы.

Диссертация состоит из введения, трёх глав, заключения и списка литературы. В работе содержится 13 таблиц, 26 рисунков и 107 библиографических ссылок. Общий объём работы составляет 105 страниц.

Во введении диссертационной работы рассмотрены подходы к моделированию аномальной диффузии, дан краткий обзор понятий дробно-дифференциального исчисления, отмечено его практическое приложение к предмету исследования. Приведено обоснование актуальности темы диссертационной работы, сформулированы цели и задачи, отмечена научная новизна, представлены данные по апробации работы и перечислены авторские публикации по теме.

Первая глава работы посвящена математической модели одномерной аномальной диффузии. Были определены исходные уравнения аномальной диффузии и описаны подходы к их численному решению. Представлены методы конечных разностей повышенного порядка точности и методы случайного блуждания. С целью верификации используемых алгоритмов расчёта проведено сравнение численных и аналитических решений тестовых задач, а также численных решений, полученных независимыми друг от друга способами.

Во второй главе исследуются процессы аномальной диффузии бильярдного газа в полигональном канале. Представленные в главе результаты вычислительных экспериментов демонстрируют, что характеристики установившегося диффузионного режима существенно зависят от структуры препятствий в канале. С целью установления взаимосвязи микроскопического и макроскопического описания аномальной диффузии проведён подбор параметров соответствующего дробно-дифференциального уравнения и установлен характер возникающих аномалий.

В третьей главе исследуются процессы аномальной диффузии в средах с неоднородной структурой. Установлено значительное влияние микромасштабных параметров модели на характер наблюдаемой диффузии, по

данным дискретно-элементного моделирования определены параметры дробно-дифференциального уравнения, что даёт связь между различными масштабами в описании аномальной диффузии.

В заключении перечисляются основные результаты, полученные в ходе выполнения диссертационной работы.

1. ДРОБНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ К МОДЕЛИРОВАНИЮ АНОМАЛЬНОЙ ДИФФУЗИИ

Математический аппарат для описания процессов аномальной диффузии на макроуровне (в приближении сплошной среды) основан на уравнениях в частных дробных производных. При этом возможно появление как пространственных, так и эволюционных дробно-дифференциальных операторов.

1.1. Макроскопическая модель аномальной диффузии

Одномерная по пространству математическая модель аномальной диффузии представляется следующим дробно-дифференциальным уравнением:

$$\frac{\partial^\gamma c(x,t)}{\partial t^\gamma} = D \frac{\partial^\alpha c(x,t)}{\partial x^\alpha}, \quad (14)$$

где $c(x,t)$ – объёмная концентрация диффундирующих частиц, D – коэффициент диффузии ($D > 0$), α и γ – параметры, характеризующие порядок дробных производных по пространству и времени соответственно, из физических соображений следуют условия $0 < \gamma \leq 1$ и $1 < \alpha \leq 2$.

Данное уравнение получается из классического дифференциального уравнения диффузии (теплопроводности) заменой производной второго порядка по пространственной координате на дробную производную $\frac{\partial^\alpha c(x,t)}{\partial x^\alpha}$ и заменой производной первого порядка по временной координате на дробную производную $\frac{\partial^\gamma c(x,t)}{\partial t^\gamma}$. Здесь выражение $\frac{\partial^\gamma c(x,t)}{\partial t^\gamma}$ представляет собой левостороннюю дробную производную, а $\frac{\partial^\alpha c(x,t)}{\partial x^\alpha}$ – двустороннюю (взвешенная комбинация левосторонней и правосторонней):

$$\frac{\partial^\alpha c(x,t)}{\partial x^\alpha} = C_+ \frac{\partial_+^\alpha c(x,t)}{\partial x^\alpha} + C_- \frac{\partial_-^\alpha c(x,t)}{\partial x^\alpha}, \quad (15)$$

где $C_+ \geq 0$, $C_- \geq 0$ и $C_+ + C_- = 1$.

Необходимые односторонние дробные производные произвольных порядков α и γ определяются формулами Римана-Лиувилля (6) – (7) для дробной производной Лиувилля и Вейля:

$$\frac{\partial^\gamma c(x,t)}{\partial t^\gamma} = \frac{\partial_+^\gamma c(x,t)}{\partial t^\gamma} = \frac{1}{\Gamma([\gamma]+1-\gamma)} \frac{d^{[\gamma]+1}}{dt^{[\gamma]+1}} \int_{-\infty}^t (t-\tau)^{[\gamma]-\gamma} c(x,\tau) d\tau, \quad (16)$$

$$\frac{\partial_+^\alpha c(x,t)}{\partial x^\alpha} = \frac{1}{\Gamma([\alpha]+1-\alpha)} \frac{d^{[\alpha]+1}}{dx^{[\alpha]+1}} \int_{-\infty}^x (x-\tau)^{[\alpha]-\alpha} c(\tau,t) d\tau, \quad (17)$$

$$\frac{\partial_-^\alpha c(x,t)}{\partial x^\alpha} = \frac{(-1)^{[\alpha]+1}}{\Gamma([\alpha]+1-\alpha)} \frac{d^{[\alpha]+1}}{dx^{[\alpha]+1}} \int_x^{+\infty} (\tau-x)^{[\alpha]-\alpha} c(\tau,t) d\tau. \quad (18)$$

В несколько более общем случае аномальная диффузия может быть описана дробно-дифференциальным уравнением:

$$\frac{\partial^\gamma c(x,t)}{\partial t^\gamma} = D \frac{\partial^\alpha c(x,t)}{\partial x^\alpha} - V \frac{\partial c(x,t)}{\partial x}, \quad (19)$$

По сравнению с уравнением (14) в нём присутствует дополнительное конвективное слагаемое $-V \frac{\partial c(x,t)}{\partial x}$ со скоростью сноса V .

В обоих случаях диффузия рассматривается на всём одномерном пространстве, т.е. граничных условий нет (решается задача Коши). В качестве начального условия может быть задана любая неотрицательная функция из пространства $L_1(-\infty; +\infty)$, т.е. $c(x,0) = f(x) \geq 0$, $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = C_0 < \infty$, в том числе возможно и $c(x,0) = C_0 \cdot \delta(x)$. В последнем случае часто полагают $C_0 = 1$.

Параметр γ в уравнении (14) отвечает за появление субдиффузии – при $\alpha=2$ уравнение (14) описывает аномальную диффузию с зависимостью $\langle r^2 \rangle \sim t^\gamma$. Параметр α отвечает за появление супердиффузии – при $\gamma=1$ уравнение (14) описывает аномальную диффузию с зависимостью $\langle r^2 \rangle \sim t^{2/\alpha}$. Комбинация обоих параметров в уравнении (14) может описывать аномальную диффузию как в режиме субдиффузии, так и в режиме супердиффузии $\langle r^2 \rangle \sim t^{p=2\gamma/\alpha}$ ($0 < p < 2$) – в зависимости от того, какой механизм является преобладающим. Очевидно, что в предельном случае $\alpha=2$, $\gamma=1$ уравнение (14)

описывает классическую диффузию.

В то же время, важно отметить, что существуют и другие параметры α и γ , при которых уравнение (14) описывает уже отличную от классической диффузию, но также с $p = 1$ (квазиклассическую диффузию). Таким образом, соответствие показателя степени p и пары параметров (α, γ) не является взаимно однозначным, т.е. одному и тому же значению p соответствует бесконечное количество комбинаций параметров α и γ уравнения (14), описывающих разные диффузионные процессы. Это означает, что одних только внешних наблюдений за конкретным диффузионным процессом (т.е. за $\langle r^2 \rangle$) недостаточно для его однозначного описания уравнением (14), необходима ещё конкретизация вклада каждой из аномалий, что можно сделать, только обладая описанием происходящего процесса на микроуровне.

В силу сложности дробно-дифференциальных уравнений нахождение аналитических решений рассматриваемого класса задач затруднительно. В некоторых случаях для уравнения аномальной диффузии методом преобразований Фурье может быть найдено аналитическое решение (соответствующая функция плотности вероятности) [19,63]. Например, в случае $\gamma = 1$ и $1 < \alpha \leq 2$ решение уравнения (19) может быть записано как:

$$\begin{cases} c(x, t) = \frac{1}{\sigma} f_{\alpha} \left(\frac{x - Vt}{\sigma} \right), \sigma = \left(\left| \cos \frac{\pi \alpha}{2} \right| \cdot Dt \right)^{\frac{1}{\alpha}} \\ f_{\alpha}(x, \theta) = \frac{1}{\pi x} \sum_{k=1}^{\infty} (-x)^k \frac{\Gamma(\frac{k}{\alpha} + 1)}{k!} \sin \left[\frac{\pi k}{2\alpha} (\theta - \alpha) \right], x \geq 0 \\ f_{\alpha}(-x, \theta) = f_{\alpha}(x, -\theta), x < 0 \\ \theta = \frac{2}{\pi} \arctan \left((C_+ - C_-) \tan \frac{\pi(\alpha - 2)}{2} \right) \end{cases} \quad (20)$$

Тем не менее, в сравнении с дифференциальными уравнениями с производными целого порядка поиск аналитического решения различных дифференциальных уравнений с дробными производными для конкретных прикладных задач гораздо более сложен. Кроме того, даже и найденные в простейших случаях аналитические решения громоздки и неудобны для

дальнейшего изучения и применения. Вместо поиска аналитического решения представляется естественным численное решение дифференциальных уравнений с дробными производными, возникающих в этих задачах, что тем более эффективно вследствие развития мощностей современных ЭВМ и возможности эффективного распараллеливания вычислений на многопроцессорных ЭВМ.

Поэтому перейдем к рассмотрению численных методов решения задачи. Здесь можно использовать два сорта методов: метод конечных разностей и метод случайного блуждания.

1.2. Конечно-разностные методы решения дробно-дифференциальных уравнений

Конечно-разностные методы решения дробно-дифференциальных уравнений типа (14) основаны на аппроксимации дробных производных на координатных сетках с шагами h и τ по пространству и времени соответственно с использованием формул Грюнвальда-Летникова (12) – (13), которые эквивалентны формулам (16) – (18):

$$\frac{\partial_+^\gamma c(x, t)}{\partial t^\gamma} = \frac{1}{\Gamma(-\gamma)} \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau^\gamma} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(k-\gamma)}{\Gamma(k+1)} c(x, t-k\tau), \quad (21)$$

для дробной производной по времени,

$$\frac{\partial_+^\alpha c(x, t)}{\partial x^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(-\alpha)} \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(k-\alpha)}{\Gamma(k+1)} c(x-kh, t), \quad (22)$$

для левосторонней дробной производной по пространству, и

$$\frac{\partial_-^\alpha c(x, t)}{\partial x^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(-\alpha)} \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(k-\alpha)}{\Gamma(k+1)} c(x+kh, t), \quad (23)$$

для правосторонней дробной производной по пространству.

Пусть пространство $L \leq x \leq R$ и время $0 \leq t \leq T$ разбиты пространственно-временной сеткой $x_i = L + ih, h > 0, i = 0, 1, 2, \dots, K$ и $t_n = n\tau, \tau > 0, n = 0, 1, 2, \dots, N$.

Тогда, как следствие формул (21) – (23), дробные производные уравнения (14) будут аппроксимированы в узлах сетки (x_i, t_n) с шагами h, τ следующим образом:

$$\frac{\partial_+^\gamma c(x_i, t_n)}{\partial t^\gamma} = \frac{1}{\tau^\gamma} \sum_{k=0}^{\infty} g_{\gamma,k} c(x_i, t_n - (k - s_2)\tau) + O(\tau), \quad (24)$$

$$\frac{\partial_+^\alpha c(x_i, t_n)}{\partial x^\alpha} = \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^{i+s_1} g_{\alpha,k} c(x_i - (k - s_1)h, t_n) + O(h), \quad (25)$$

$$\frac{\partial_-^\alpha c(x_i, t_n)}{\partial x^\alpha} = \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^{K-i-s_1} g_{\alpha,k} c(x_i + (k - s_1)h, t_n) + O(h), \quad (26)$$

где $g_{\alpha,k} = \frac{\Gamma(k - \alpha)}{\Gamma(-\alpha)\Gamma(k + 1)}$ – нормированные веса Грюнвальда–Летникова, а $s \geq 0$ – целое значение сдвига для модифицированной (смещённой) формулы Грюнвальда–Летникова.

В статье [25] доказано, что подобная аппроксимация действительно приближает исходные дробные производные с первым порядком точности. При этом для совпадения формул (25) – (26) с формулами (22) – (23) подразумевается продолжение нулём функции $c(x)$ на бесконечность влево от L и вправо от R .

Важно отметить, что хотя любой сдвиг (даже в случае несмещённой формы $s = 0$) даёт первый порядок точности, наилучшее приближение достигается при минимизации модуля разности $|s - \alpha/2|$, т. е. оптимальное значение сдвига s зависит от порядка производной α [25]. В частности, для значений $0 < \alpha \leq 1$ берётся $s = 0$, а для $1 < \alpha \leq 2$ берётся $s = 1$.

Таким образом, положив в (24) – (26) $s_1 = 1$ и $s_2 = 0$, получим окончательные выражения для аппроксимации уравнения (14):

$$\frac{\partial^\gamma c(x_i, t_n)}{\partial t^\gamma} = \frac{\partial_+^\gamma c(x_i, t_n)}{\partial t^\gamma} = \frac{1}{\tau^\gamma} \sum_{k=0}^{\infty} g_{\gamma,k} c(x_i, t_{n-k}) + O(\tau), \quad (27)$$

$$\frac{\partial_+^\alpha c(x_i, t_n)}{\partial x^\alpha} = \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^{i+1} g_{\alpha,k} c(x_{i-k+1}, t_n) + O(h), \quad (28)$$

$$\frac{\partial_-^\alpha c(x_i, t_n)}{\partial x^\alpha} = \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^{K-i-1} g_{\alpha,k} c(x_{i+k-1}, t_n) + O(h), \quad (29)$$

$$\frac{\partial^\alpha c(x_i, t_n)}{\partial x^\alpha} = C_+ \cdot \frac{\partial_+^\alpha c(x_i, t_n)}{\partial x^\alpha} + C_- \cdot \frac{\partial_-^\alpha c(x_i, t_n)}{\partial x^\alpha}. \quad (30)$$

Кроме того, приближая производную конвективного слагаемого центральной разностью, получим выражения и для аппроксимации слагаемых

уравнения (19):

$$\frac{\partial c(x_i, t_n)}{\partial x} = \frac{c(x_{i+1}, t_n) - c(x_{i-1}, t_n)}{2h} + O(h^2). \quad (31)$$

Наконец, начальное условие уравнения (14) $c(x, 0) = C_0 \cdot \delta(x)$ в дискретном виде будет выглядеть как $c(x_{K/2}, 0) = C_0/h$.

Изложенный подход позволяет строить явные и неявные конечно-разностные схемы для дробно-дифференциальных уравнений. Вопросы аппроксимации и устойчивости таких схем подробно рассмотрены в работах [3,25,27,75]. Здесь следует обратить внимание на следующие моменты. Применение смещённой формулы Грюнвальда–Летникова ($s_I = 1$) для аппроксимации пространственной дробной производной уравнения (14) принципиально, так как явный и неявный методы, основанные на использовании стандартной формулы Грюнвальда–Летникова ($s_I = 0$), оказываются неустойчивыми, как доказано в [27]. Введение смещения позволяет получить для уравнения (14) условно устойчивую явную схему (с условием устойчивости $D \frac{\tau^\gamma}{h^\alpha} \leq \frac{\gamma}{\alpha}$) и абсолютно устойчивую неявную схему. При этом схемы имеют первый порядок точности по времени и пространству. Отметим, что в связи с нелокальным характером дробных производных матрица дискретного аналога не является разреженной. Это существенно отличает данный класс задач от задач классической диффузии.

1.3. Методы повышенного порядка точности

Существенный недостаток конечно-разностных алгоритмов заключается в том, что порядок точности полученных схем – первый по всем переменным. Это означает, что для достижения приемлемой погрешности придётся использовать достаточно мелкие сетки, что отрицательно скажется на скорости решения задачи. По этой причине возникает необходимость поиска способов решения дробно-дифференциальных уравнений, которые обеспечивали бы более высокий порядок точности численного решения. В настоящей работе предлагается семейство схем повышенного порядка точности.

Для повышения порядка точности численного решения дробно-дифференциального уравнения в настоящей работе была использована идея метода Рунге–Ромберга–Ричардсона, основанная на использовании дробных сеток [104-106].

Пусть на двух пропорциональных (с целым коэффициентом r) сетках получена пара численных решений функции $c(x, t)$ с порядком точности равным k (по обеим переменным), тогда по ним можно построить новое численное решение на более крупной из двух исходных сетке с порядком точности $k+1$ по формуле:

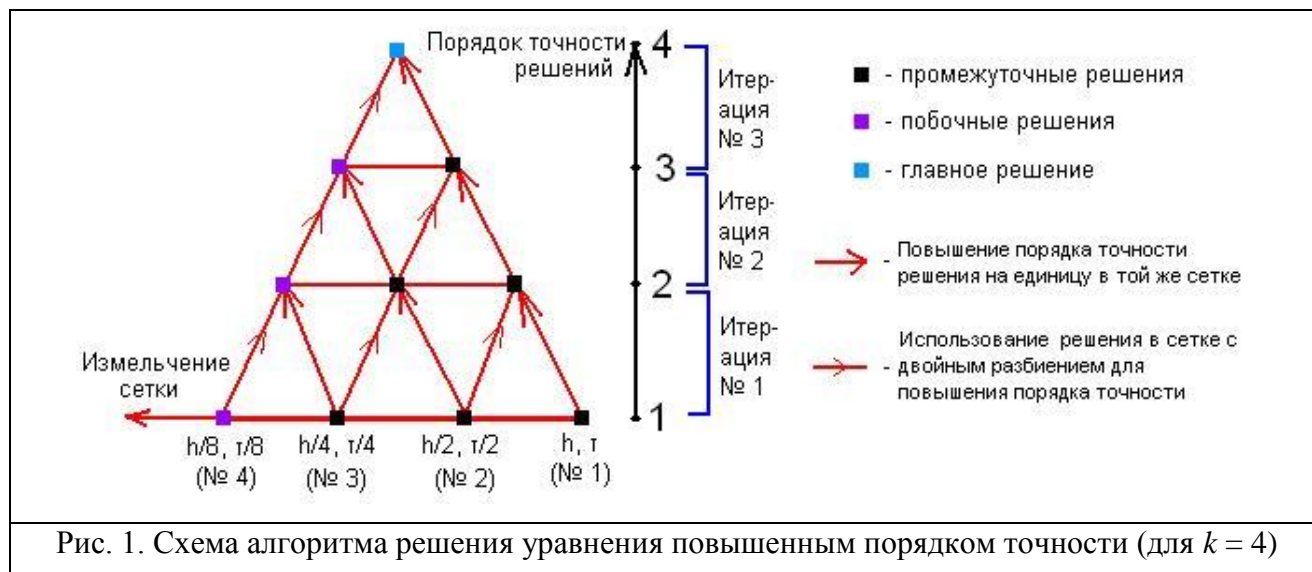
$$\tilde{c}_{h\tau}(x, t, h, \tau) = \frac{r^k \cdot \tilde{c}_{h\tau}(x, t, \frac{h}{r}, \frac{\tau}{r}) - \tilde{c}_{h\tau}(x, t, h, \tau)}{r^k - 1}, \quad (32)$$

при этом $c(x) = \tilde{c}_{h\tau}(x, t, h, \tau) + O(h^{k+1} + \tau^{k+1})$.

Кроме того, следует отметить, что, имея пару численных решений на двух сетках с разными коэффициентами пропорциональности по x и по t , выбрав один из них в качестве параметра, можно повысить на единицу порядок точности только по одной переменной, оставив порядок по другой переменной прежним. Это может иметь смысл, когда ошибка по одной переменной в абсолютном значении невелика по сравнению с ошибкой, вносимой аппроксимацией по другой переменной, и, с целью ускорения решения, повышается порядок точности только по второй переменной с сохранением разбиения по первой переменной.

Обладая механизмом (32) повышения порядка точности численного решения задачи на единицу, можно составить пирамидальный алгоритм, позволяющий численно решать дифференциальные уравнения с дробными производными с произвольным порядком точности k . Для этого сначала искомая задача решается одним из конечно-разностных методов первого порядка k раз на пропорционально измельчённых сетках, после чего проводится $k-1$ уточнение, на каждом из которых на основе набора полученных решений с предыдущего шага строятся новые решения с повышенным на единицу порядком точности на тех же сетках, кроме самой мелкой.

Схематично этот процесс можно изобразить следующим образом (рис. 1).



Таким способом можно осуществить численное решение уравнения (14) с любым заданным порядком точности, однако решение с более высоким порядком точности, естественно, занимает и большее количество времени. Поэтому необходимо выяснить, дают ли преимущество предложенные алгоритмы, или же при соответствующих сетках одна и та же величина ошибки по-прежнему достигается быстрее при решении задачи алгоритмом с первым порядком точности.

С целью решения вопроса о целесообразности применения схем высокого порядка точности к решению дробно-дифференциальных уравнений, построим зависимости $N(\varepsilon)$ количества требуемых для решения задачи процессорных операций (или количества затраченного времени) N от возникающей ошибки решения ε на большом наборе сеток с пропорциональным изменением значений шагов по времени и по пространству.

Изучим поведение этих зависимостей для схем различного порядка точности на следующем тестовом примере дробно-дифференциального уравнения, для которого известно точное аналитическое решение [75].

Численно неявным конечно-разностным методом решалось следующее уравнение аномальной диффузии:

$$\frac{\partial^\gamma c(x,t)}{\partial t^\gamma} = \frac{\Gamma(3-\alpha)}{\Gamma(3)} x^\alpha \cdot \frac{\partial^\alpha c_+(x,t)}{\partial x^\alpha} + \frac{\Gamma(3)}{\Gamma(3-\gamma)} t^{2-\gamma} x^2 - t^2 x^2,$$

для $\alpha = 1.7$, $\gamma = 0.7$ и на отрезке $0 \leq x \leq 1$ и $0 \leq t \leq 1$ с начальным условием $c(x,0) = 0$ и граничными условиями $c(0,t) = 0$ и $c(1,t) = t^2$, аналитическим решением которого является функция $c(x,t) = t^2 x^2$. Ниже на рис. 2 приведена экспериментально полученная для этого уравнения зависимость $N(\varepsilon)$.

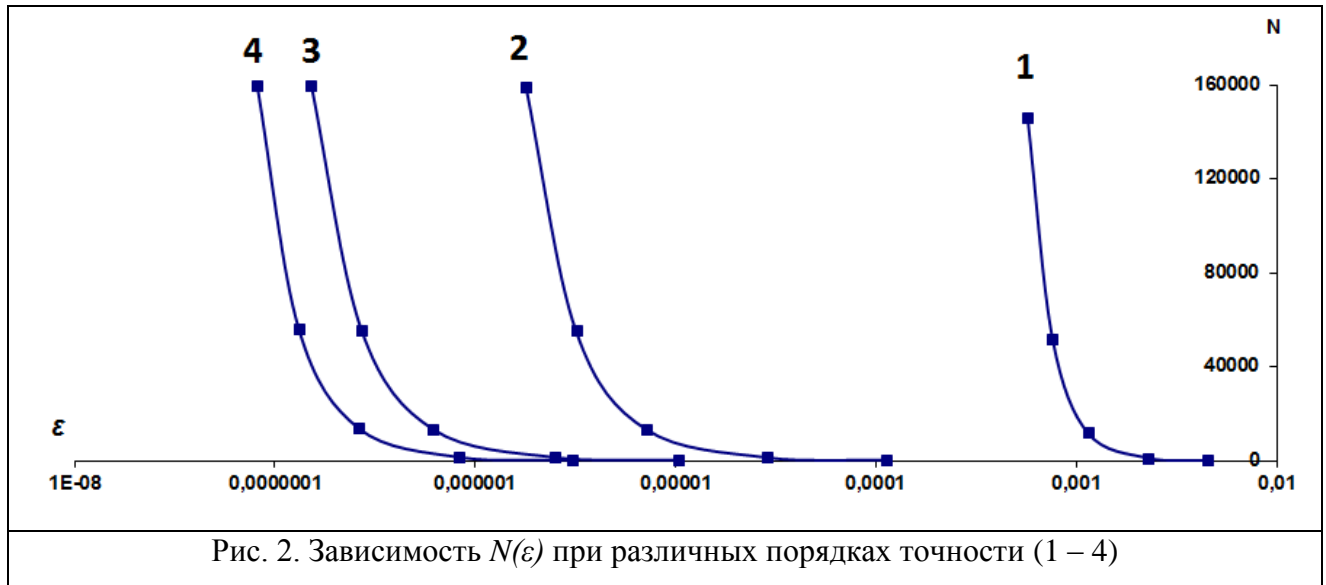


Рис. 2. Зависимость $N(\varepsilon)$ при различных порядках точности (1 – 4)

Все полученные функции $N(\varepsilon)$ убывают (ибо достижение меньшей точности требует меньше операций и времени), имеют естественное ограничений справа (т.к. существует максимальный шаг в половину отрезка), но не слева (так как шаг можно сделать меньше любого наперед заданного числа) и не имеют общих точек между собой. Так как при одном значении ε предпочтительнее функция с меньшим значением N , а при одном значении N предпочтительнее функция с меньшим значением ε , то кривая, расположенная ниже и левее всех остальных будет представлять лучшую зависимость $N(\varepsilon)$, а соответствующее ей значение порядка точности будет оптимальным.

Исходя из полученных результатов, можно сделать вывод, что эффективность решения задачи растёт с ростом порядка, но прирост эффективности становится меньше (кривые начинают располагаться всё ближе друг к другу). Строго говоря, в этом смысле наиболее эффективным для искомой задачи является её решение алгоритмом с бесконечным порядком

точности, что означает, что при решении конкретной задачи использование алгоритма с максимально большим порядком точности ограничено лишь дополнительными требованиями к отведённому на решение задачи времени или нужному порогу точности – для заданного значения ε или N существует лишь конечное число попавших в условие кривых со своим значением порядка точности.

Этот вывод будет справедлив для любых задач, т.к. полученный результат можно объяснить и теоретически. Приведённый выше алгоритм решения задачи с произвольным порядком точности обладает тем специфичным свойством (и это видно на рис. 2), что для любых h $N_q(h) \approx N_{q+1}(2h)$, т.е. для решения задачи на сетке $(h, \tau=k \cdot h)$ с порядком точности q требуется примерно такое же количество операций (времени), что и для её решения на в два раза более крупной сетке $(2h, \tau=k \cdot 2h)$ порядком точности $q+1$. Действительно, практически вся вычислительная нагрузка алгоритма лежит на его первом вычислительном этапе, при этом в первом случае необходимо q раз решить задачу первым порядком на всех сетках от $(h, \tau=k \cdot h)$ до $(h/2^{q-1}, \tau/2^{q-1})$, а во втором случае надо $q+1$ раз решить её на всех сетках от $(2h, \tau=k \cdot 2h)$ до $(2h/2^q=h/2^{q-1}, 2\tau/2^q=\tau/2^{q-1})$, что тождественно с точностью до ресурсов, потраченных на решение задачи на сетке $(2h, \tau=k \cdot 2h)$, которые можно не брать в расчёт, т.к. порядок по h функции $N_q(h)$ определяется только ресурсами, затраченными на решение на самой мелкой сетке $(h/2^{q-1}, \tau/2^{q-1})$.

Возникающие же при этом ошибки оказываются разных порядков: $\varepsilon_q(h) = \frac{(\alpha_1 + \beta_1 \cdot k^q)}{|c(x_{i0}, t_{n0})|} \cdot h^q + O(h^{q+1}) \approx C_1 \cdot h^q = O(h^q)$ для порядка точности q на сетке $(h, \tau=k \cdot h)$, $\varepsilon_{q+1}(2h) = \frac{(\alpha_2 + \beta_2 \cdot k^{q+1})}{|c(x_{i0}, t_{n0})|} \cdot 2^{q+1} \cdot h^{q+1} + O(h^{q+2}) \approx C_2 \cdot h^{q+1} = O(h^{q+1})$ для порядка точности $q+1$ на сетке $(2h, \tau=k \cdot 2h)$ и $\varepsilon_{q+1}(2h) < \varepsilon_q(h)$ всегда для достаточно мелких шагов h . Следовательно, две убывающие кривые $N_q(\varepsilon)$ и $N_{q+1}(\varepsilon)$, для которых верно $N_q(\varepsilon_1) = N_{q+1}(\varepsilon_2)$ при $\varepsilon_2 < \varepsilon_1$, нигде не пересекаются и вторая лежит левее и ниже первой, что и означает более высокую

эффективность при решении задачи порядком $q+1$ по сравнению с q (при одинаковых временных затратах решение задачи более высоким порядком получилось точнее).

В результате, на представительном наборе задач, имеющих аналитическое решение, была проанализирована эффективность методов повышенного порядка точности с позиций критерия «точность – вычислительные затраты», и было показано, что предложенное семейство алгоритмов повышенного порядка точности действительно даёт преимущество и при соответствующих сетках одна и та же величина погрешности достигается тем быстрее, чем выше порядок точности схемы, использованной при решении задачи.

1.4. Метод случайного блуждания

В связи с описанными выше сложностями, возникающими при использовании конечно-разностных методов для решения дробно-дифференциальных уравнений, весомой альтернативой конечно-разностной аппроксимации является метод случайного блуждания по сетке. При этом вероятности соответствующих перемещений полностью определяются только набором величин, включающим параметры уравнения α , γ , D , V и сеточные параметры h , τ . Такой подход является естественным обобщением метода Монте-Карло для уравнения классической диффузии. Будучи микроскопическим по форме, он остается макроскопическим по существу, а точность итогового решения зависит только от выбранного числа симуляций (и в пределе численное решение сходится к точному). Для уравнения (14) в частном случае $\gamma = 1$, $V = 0$ построение соответствующей модели случайного блуждания изложено в [32]. Здесь же рассмотрим этот метод для общего случая, представленного уравнением (14) или уравнением (19).

Запишем уравнение (19) в дискретном виде, воспользовавшись формулами (27) – (31) и перейдя от объёмной концентрации $c(x_i, t_n)$ сначала к относительной концентрации (или плотности вероятности) $c(x_i, t_n)/C_0$, а затем и

к относительному (отнесенному к общему количеству частиц в системе) числу частиц в ячейке (или вероятности нахождения частицы в ячейке) $y(x_i, t_n)$,

приняв $y_i(t_n) = \frac{1}{C_0} \cdot \int_{x_i-h/2}^{x_i+h/2} c(x, t_n) dx = \frac{1}{C_0} \cdot h \cdot c(x_i, t_n)$:

$$\frac{\partial^\gamma y(x_i, t_n)}{\partial t^\gamma} = D \cdot (C_+ \cdot \frac{\partial^\alpha y(x_i, t_{n-1})}{\partial x^\alpha} + C_- \cdot \frac{\partial^\alpha y(x_i, t_{n-1})}{\partial x^\alpha}) - V \cdot \frac{\partial y(x_i, t_{n-1})}{\partial x} \quad (33)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\tau^\gamma} \sum_{m=0}^{\infty} g_{\gamma, m} y_{i, n-m} = \\ & = D \cdot (C_+ \cdot \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^{\infty} g_{\alpha, k} y_{i-k+1, n-1} + C_- \cdot \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^{\infty} g_{\alpha, k} y_{i+k-1, n-1}) - V \cdot \frac{y_{i+1, n-1} - y_{i-1, n-1}}{2h} \end{aligned} \quad (34)$$

$$\begin{aligned} & y_{i, n} = \gamma \cdot y_{i, n-1} - \sum_{m=2}^{\infty} g_{\gamma, m} y_{i, n-m} + \\ & + D \cdot \frac{\tau^\gamma}{h^\alpha} (C_+ \cdot \sum_{k=0}^{\infty} g_{\alpha, k} y_{i-k+1, n-1} + C_- \cdot \sum_{k=0}^{\infty} g_{\alpha, k} y_{i+k-1, n-1}) - V \tau^\gamma \cdot \frac{y_{i+1, n-1} - y_{i-1, n-1}}{2h} \end{aligned} \quad (35)$$

Уравнение (35) можно понимать не только как алгоритм явной конечно-разностной схемы для вычисления значений $y(x_i, t_n)$ на следующем временном слое по значениям на предыдущем $y(x_i, t_{n-1})$, но и как руководство к осуществлению случайного блуждания частицы по сетке с соответствующими коэффициентами перехода, стоящими при вероятностях нахождения y_i в ходе их перераспределения по правилу:

$$y_i(t_n) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} p_k y_{i-k}(t_{n-1}) + \sum_{m=2}^{+\infty} q_m y_i(t_{n-m}). \quad (36)$$

Эти коэффициенты и есть нужные для модели случайного блуждания вероятности p и q : p – вероятность прыжков по пространству (из любой точки слева или справа), а q – вероятность прыжка по времени (из любого предыдущего момента в той же точке).

Процесс перераспределения является пространственно однородным (вероятности прыжков p_k и q_m не зависят от i) и стационарным (вероятности p_k и q_m не зависят от n).

После группировки слагаемых в выражении (35) в соответствии с формулой (36) соответствующие вероятности прыжков p по пространству и q по времени можно определить ($m \geq 2$):

$$\begin{cases} p_0 = \gamma - D \cdot \frac{\tau^\gamma}{h^\alpha} (C_+ + C_-) \cdot \alpha \\ p_{\pm 1} = D \cdot \frac{\tau^\gamma}{h^\alpha} \left(\frac{\alpha(\alpha-1)}{2} C_{\pm} + C_{\mp} \right) \pm V \cdot \frac{\tau^\gamma}{2h} \\ p_{\pm k} = D \cdot \frac{\tau^\gamma}{h^\alpha} \cdot g(\alpha, k+1) \cdot C_{\pm} \\ q_m = -g(\gamma, m) \end{cases} \quad (37)$$

Часто рассматривается случай без перекоса дробной производной по пространству в одну из сторон (симметричное распределение частиц в системе). Тогда полагается $C_+ = C_- = 1/2$.

Кроме того, интересно отметить, что даже в случае односторонней дробной производной по пространству ($C_+ = 0$ или $C_- = 0$) случайное блуждание полностью односторонним не будет, что приведёт к образованию в противоположном направлении экспоненциально убывающего «хвоста» в распределении частиц.

Теперь нужно показать, что для всех вероятностей выполнены такие важные условия, как $p_k \geq 0$ и $q_m \geq 0$, а также $\sum_{k=-\infty}^{+\infty} p_k + \sum_{m=2}^{+\infty} q_m = 1$, обеспечивающие неотрицательность числа частиц в ячейке и сохранение общего числа частиц, т.е. $y_i(t_n) \geq 0$ и $\sum_{k=-\infty}^{+\infty} y_k(t_n) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} y_k(0)$.

Первое очевидно, если вспомнить вид ряда $g(\alpha, k)$ (его начальные члены выглядят как $1, -\alpha, \alpha(\alpha-1)/2, -\alpha(\alpha-1)(\alpha-2)/6, \dots$) и учесть, что при $0 < \gamma < 1$ $g(\gamma, m)$ всегда отрицательно при $m \geq 1$, а при $1 < \alpha < 2$ $g(\alpha, k)$ всегда положительно при $k \geq 2$. При этом из первого уравнения в (37) вытекает накладываемое на параметры условие, аналогичное (так как $C_+ + C_- = 1$) условию устойчивости явной схемы:

$$D \frac{\tau^\gamma}{h^\alpha} \leq \frac{\gamma}{\alpha}, \quad (38)$$

а из второго уравнения в (37) следует побочное условие на соответствие сетки сносу (актуальное только при $V \neq 0$):

$$\frac{2D}{h^{\alpha-1}} \left(\frac{\alpha(\alpha-1)}{2} C_{\pm} + C_{\mp} \right) \geq |V|. \quad (39)$$

Для проверки второго следует учесть, что $\sum_{k=0}^{\infty} g(\alpha, k) = 0$ для любого $\alpha > 0$.

Действительно, по известной формуле $(1+z)^\alpha = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{\alpha}{k} z^k = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k g(\alpha, k) z^k$ для любого комплексного $z: |z| \leq 1$ и любого $\alpha > 0$, в том числе и для $z = -1$. Тогда:

$$\begin{aligned} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} p_k + \sum_{l=2}^{+\infty} q_l &= [\gamma + D \cdot \frac{\tau^\gamma}{h^\alpha} \cdot (C_+ + C_-) \cdot \sum_{k=0}^{\infty} g(\alpha, k)] + [-\sum_{k=0}^{\infty} g(\gamma, m) + g(\gamma, 0) + g(\gamma, 1)] = \\ &= [\gamma + 0] + [0 + 1 - \gamma] = \gamma + 1 - \gamma = 1. \end{aligned}$$

В качестве начального распределения частиц в системе (или вероятности нахождения в соответствующей ячейке в начальный момент времени) $y_i(t_0)$ при

заданном начальном условии $c(x, 0) = f(x)$ следует брать $y_i(t_0) = \frac{1}{C_0} \int_{x_i-h/2}^{x_i+h/2} f(x) dx$,

например, в частном случае $c(x, 0) = C_0 \cdot \delta(x)$ при любых h и C_0 будет:

$$\begin{cases} y_0(t_0) = 1 \\ y_i(t_0) = 0, i \neq 0 \end{cases} \quad (40)$$

Следует обратить внимание на то, что в формулах (33) – (35) (как и в формулах (24) и (27) ранее) присутствует бесконечная сумма $\sum_{m=2}^{\infty} g_{\gamma, m} y_{i, n-m}$ по

всем предыдущим моментам времени (включая даже те, что были ранее начала наблюдений вроде $y_{i, -1}$). В случае $\gamma < 1$, если начальным условием является функция, отличная от нулевой, естественным образом возникает вопрос о способе её продолжения назад на отрицательные значения времени t , что необходимо для численного решения задачи конечно-разностным способом. В настоящей работе условие $\sum_{k=-\infty}^{+\infty} y_k(t_n) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} y_k(0)$ используется для любого t_n , т.е.

для всех отрицательных слоёв принимается то же распределение $y_{i, -n}$, что и для нулевого $y_{i, 0}$. В этом случае сумма $\sum_{m=2}^{\infty} g_{\gamma, m} y_{i, n-m}$ упрощается до конечной следующим образом:

$$\sum_{m=2}^{\infty} g_{\gamma, m} y_{i, n-m} = \sum_{m=2}^n g_{\gamma, m} y_{i, n-m} + \sum_{m=n+1}^{\infty} g_{\gamma, m} y_{i, n-m} = \sum_{m=2}^n g_{\gamma, m} y_{i, n-m} - y_{i, 0} \sum_{m=0}^n g_{\gamma, m}. \quad (41)$$

Ниже на рис. 3 приведён пример решения задачи Коши с начальным условием $c(x,0) = C_0 \cdot \delta(x)$ для уравнения аномальной диффузии (14) при значениях $\alpha = 1.7$, $\gamma = 0.9$, $D = 0.0005$ и сетке $h = 0.002$, $\tau = 0.01$ на отрезке $[-0.1; 0.1]$ и случая равносторонней дробной производной по пространству ($C_+ = C_- = 1/2$) обоими методами: конечных разностей (явная схема с использованием преобразования (41) для дробной производной по времени) и случайного блуждания (10^7 симуляций). Наблюдается хорошее согласование обоих решений, что экспериментально показывает применимость такого подхода.

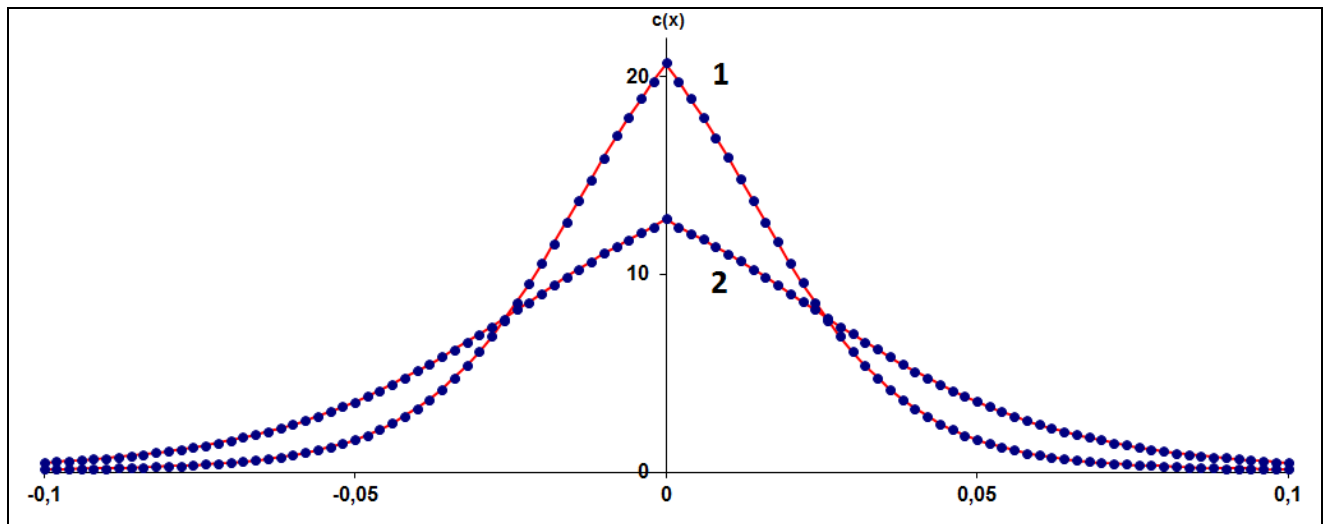


Рис. 3. Сравнение на участке $[-0.1; 0.1]$ численных решений уравнения (14) в моменты времени $t = 2$ (график 1) и $t = 5$ (график 2) различными методами: конечно-разностным (сплошная кривая) и случайного блуждания (выделено маркерами)

В заключение, следует качественно сравнить метод случайного блуждания с конечно-разностным подходом. Единственным ограничением в методе случайного блуждания является наличие (как и для явной конечно-разностной схемы) дополнительного условия на параметры $D \frac{\tau^\gamma}{h^\alpha} \leq \frac{\gamma}{\alpha}$, при котором данный подход применим (в противном случае вероятности переходов становятся отрицательными). Главное же достоинство численного решения, полученного методом случайного блуждания, в том, что оно будет действительно охватывать всю координатную прямую (т.к. ограничивается не пространство, а максимальная дальность прыжка и ловушки) в отличие от

конечно-разностного решения, получаемого на заранее заданном отрезке (вне которого искомая функция полагается равной нулю). Как следствие, погрешность решения метода случайного блуждания будет одинакова в любой точке пространства, в то время как погрешность конечно-разностного решения возрастает при приближении к границам отрезка.

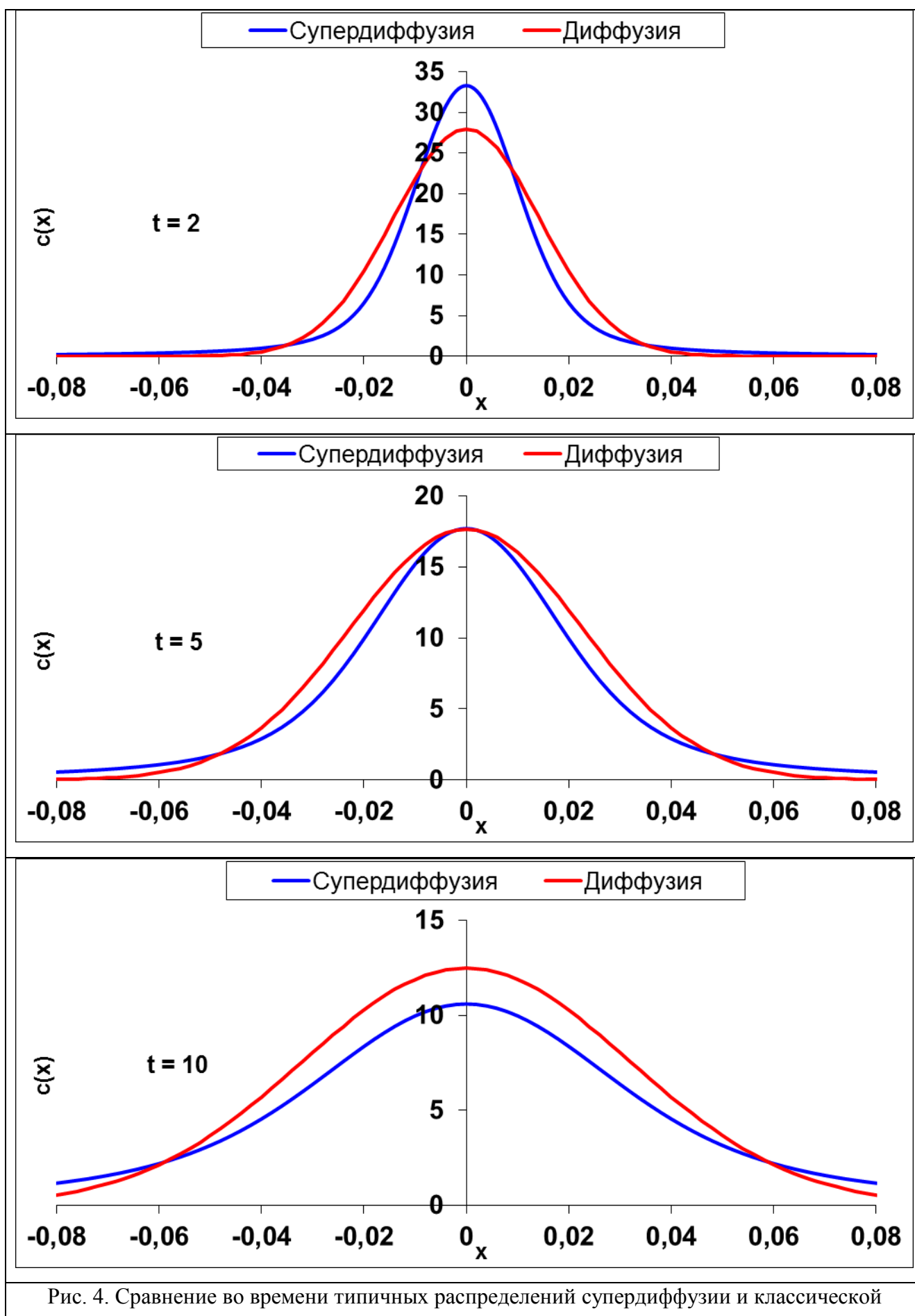
Кроме того, так как метод случайного блуждания является статистическим в основе, то его алгоритмическая сложность невелика и вычислительные затраты (количество операций N_{op}) пропорциональны числу симуляций (N_s), помноженному на количество рассчитываемых временных слоёв (N): $N_{op} \sim N_s \times N$. В то же время сложность конечно-разностного решения из-за суммирования «хвостов» в общем случае $\alpha < 2, \gamma < 1$ оценивается как $N_{op} \sim K \times N \times (K + \frac{N}{2})$ (по сравнению с $N_{op} \sim K \times N$ для классической диффузии), вследствие чего (при фиксированных шагах и разбиении) с увеличением числа рассчитываемых слоёв с некоторого момента метод случайного блуждания при той же точности начинает превосходить по скорости конечно-разностные методы.

1.5. Особенности решений дробно-дифференциальных уравнений

Отдельно стоит отметить тот факт, что в то время как решение задачи Коши для классического уравнения диффузии, т.е. уравнения (14) при значении параметров $\alpha = 2$ и $\gamma = 1$, даёт плотность вероятности $c(x,t)/C_0$, представляющую собой распределение Гаусса:

$$c(x,t)/C_0 = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}, \sigma^2 = 2Dt, \quad (42)$$

то решения уравнения аномальной диффузии описываются функциями плотности вероятности из множества устойчивых и дробно-устойчивых распределений, большинство из которых не имеет явного аналитического выражения [10,32]. Эти функции обладают некоторыми внешне заметными особенностями.



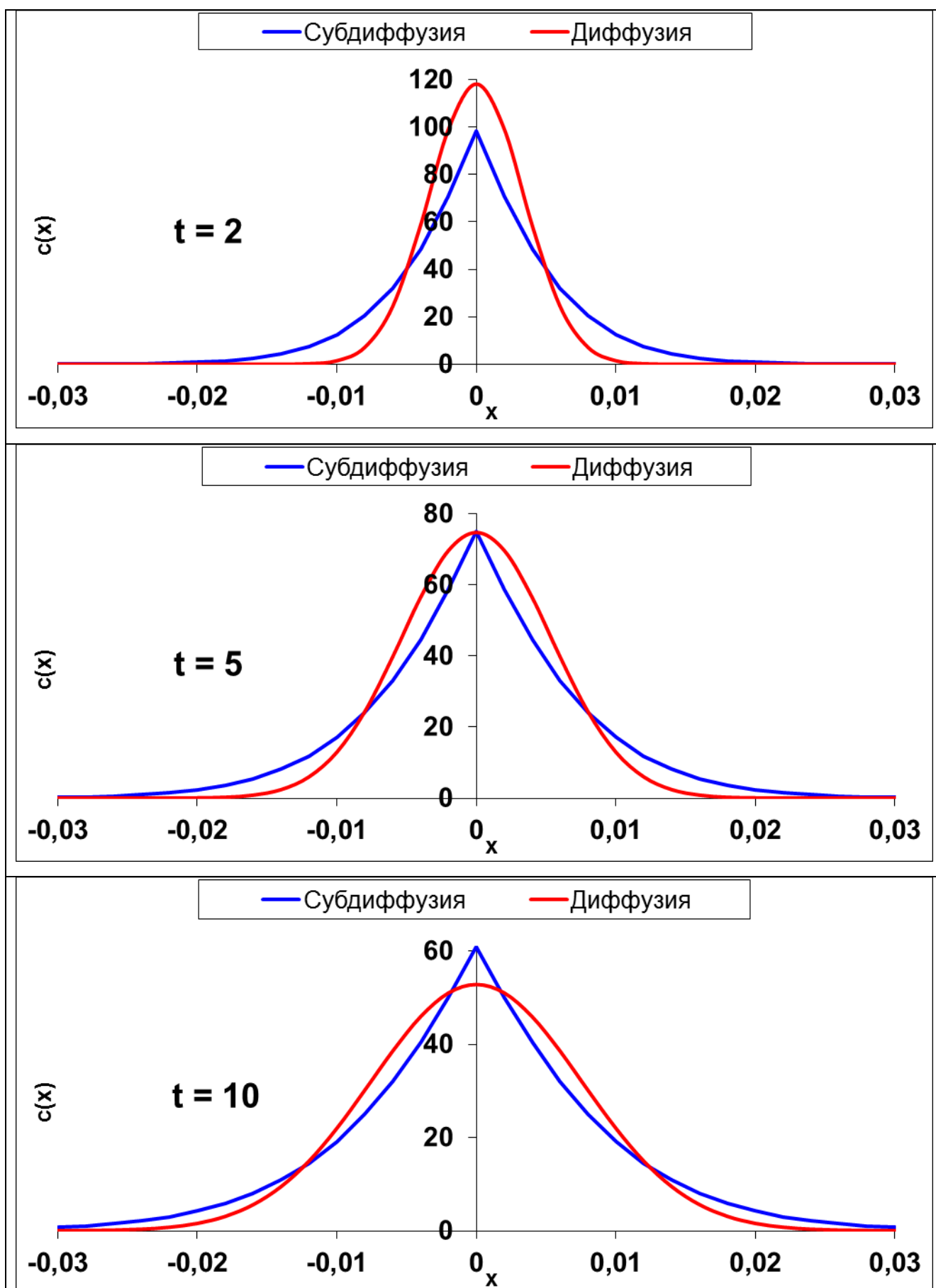


Рис. 5. Сравнение во времени типичных распределений субдиффузии и классической

Супердиффузия наблюдается при значениях $\alpha < 2$ (см. рис. 4). По сравнению с распределением Гаусса максимум концентрации убывает быстрее, присутствуют «тяжёлые хвосты», убывающие по степенному закону, а не экспоненциальному (оба, если $C_+ \neq 0$ и $C_- \neq 0$).

Субдиффузия наблюдается при значениях $\gamma < 1$ (см. рис. 5). По сравнению с распределением Гаусса максимум концентрации убывает медленнее, присутствует «острый» (недифференцируемый) пик в начальной точке $x = 0$.

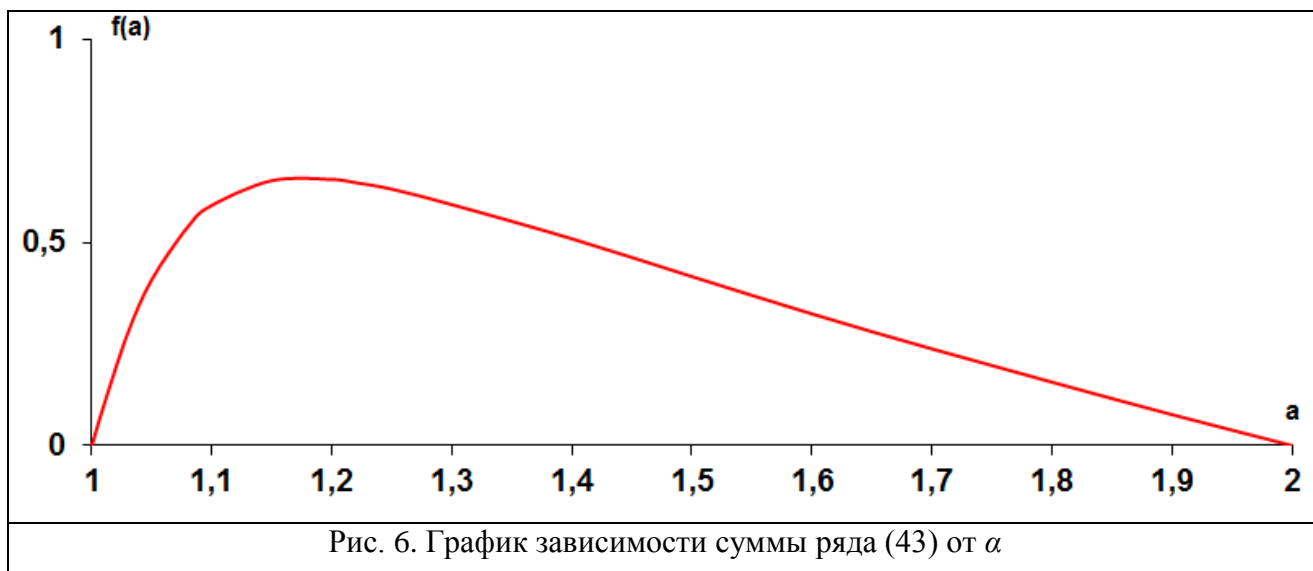
Комбинированная диффузия сочетает признаки супердиффузии и субдиффузии, а по сравнению с распределением Гаусса максимум концентрации может убывать и быстрее, и медленнее – в зависимости от того, какой механизм будет преобладать.

В завершение, следует заметить следующее. Большинство численных методов решения дробно-дифференциальных уравнений, так или иначе, основано на аппроксимации дробных производных с использованием формул Грюнвальда-Летникова. Однако такое численное решение уравнения (14) для заданных h и τ при начальном условии $c(x, 0) = C_0 \cdot \delta(x)$ имеет свои особенности в зависимости от различных α и γ , особенно при их экстремальных значениях (близких к 1 и близких к 0 соответственно).

Действительно, построив зависимость от α суммы ряда

$$\sum_{k=3}^{\infty} g(\alpha, k) = \frac{-\alpha(\alpha-1)(\alpha-2)}{6} + \frac{\alpha(\alpha-1)(\alpha-2)(\alpha-3)}{24} + \dots = f(\alpha) \quad (43)$$

из формулы (37) для дальних прыжков, можно отметить, что она не является монотонно убывающей (см. рис. 6), и при значениях α близких к 1 наблюдаются серьёзные искажения, а при $\alpha = 1$ вообще $f(\alpha) = 0$.



В результате, численные решения уравнения (14) с экстремальными значениями параметров α и γ будут весьма далеки от истины. Вследствие отсутствия дальних прыжков они вновь будут приближаться к распределению Гаусса, но с наблюдаемым коэффициентом диффузии, зависящим от сеточных параметров. Однако в целом, в большинстве случаев подход к численному решению уравнения аномальной диффузии на основе формул Грюнвальда-Летникова работает вполне удовлетворительно, т.к. такие сильные аномалии наблюдаются редко. Тем не менее, в связи с этим отдельный интерес представляют и подходы к решению дробно-дифференциальных уравнений нейросетевыми методами [74].

Выводы к главе 1

В первой главе был рассмотрен подход к описанию аномальной диффузии в приближении сплошной среды, по результатам чего можно сделать следующие выводы:

1. Математическая модель одномерной аномальной диффузии на макроуровне представляется дробно-дифференциальным уравнением (14), для численного решения которого существует целый ряд подходов.
2. На конечно-разностном подходе к решению уравнения аномальной диффузии основываются разработанные алгоритмы повышенного порядка

точности, обладающие преимуществом по сравнению со схемами первого порядка точности.

3. В качестве альтернативы конечно-разностным методам численного решения дробно-дифференциальных уравнений предлагается метод случайного блуждания (с учётом временной аномалии и конвекции), обладающий большей эффективностью при наличии временной аномалии.

4. Решения уравнения аномальной диффузии описываются функциями плотности вероятности из множества устойчивых и дробно-устойчивых распределений, которые обладают некоторыми внешне заметными особенностями.

2. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АНОМАЛЬНОЙ ДИФФУЗИИ БИЛЬЯРДНОГО ГАЗА В ПОЛИГОНАЛЬНОМ КАНАЛЕ

В этой и следующей главах рассматриваются вопросы описания процессов аномальной диффузии на микроуровне в сочетании с соответствующими математическими уравнениями на макроуровне.

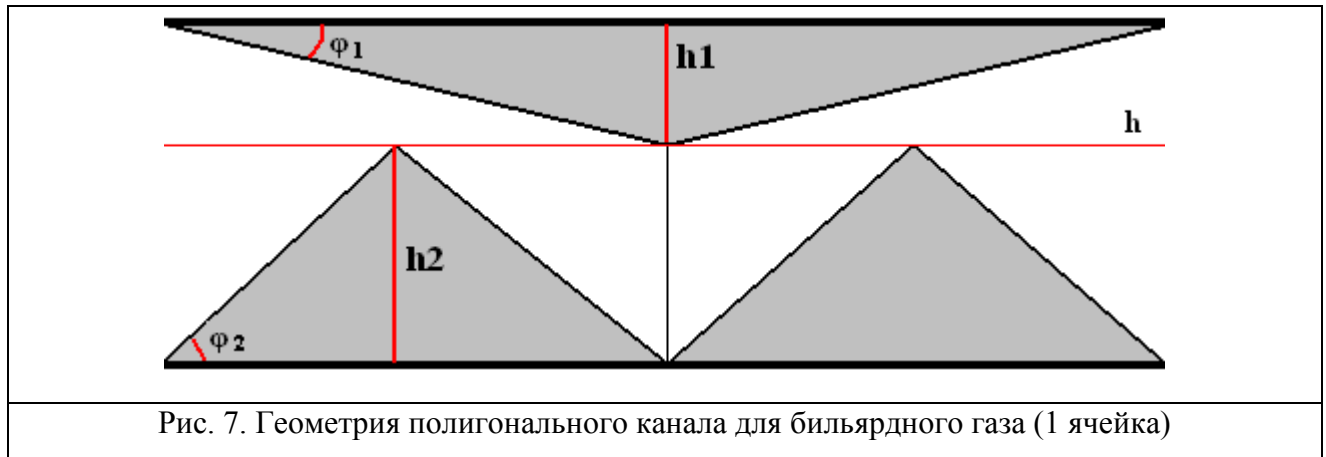
Микроскопический подход к описанию одномерной аномальной диффузии в общем случае основан на прямом численном моделировании динамики представительного ансамбля независимых частиц, движущихся в некоторой среде по определённым правилам. Расчёт пространственно-временной эволюции этих частиц и дальнейшее осреднение по ансамблю соответствующих параметров, в том числе зависимости $\langle \Delta x^2 \rangle(t)$, позволяет определить характер диффузии и выразить его численно числом p . Полученное распределение затем возможно сравнить с результатом численного решения дробно-дифференциального уравнения (14).

2.1. Дискретно-элементная модель бильярдного газа

Одним из ярких представителей систем с аномальной диффузией на микроуровне является модель бильярдного газа в специально профилированном канале, содержащем препятствия некоторой формы на обеих его стенках вдоль всей своей длины. В нём происходит равномерное и прямолинейное движение ансамбля частиц с зеркальным отражением от стенок. Различные каналы отличаются геометрической конфигурацией, которая влияет на итоговые диффузионные свойства бильярдного газа. Подробнее вопрос о различных конфигурациях каналов и соответствующих им характерах диффузии рассмотрен в [87].

Одной из наиболее интересных конфигураций с точки зрения изучения аномальных диффузионных свойств (её предложили D. Alonso, A. Ruiz и I. de Vega, см [87]), является модель полигонального канала для бильярдного газа.

Геометрия данного канала показана ниже на рис. 7.

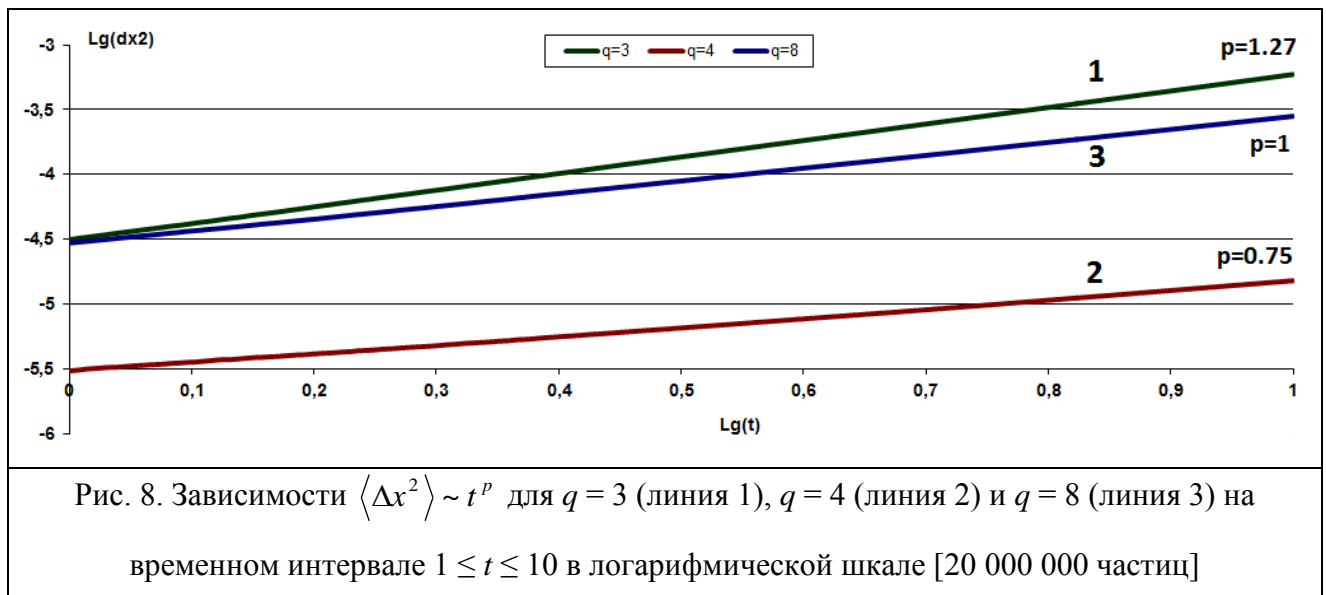


Ширина канала определяется как

$$H = h_1 + h_2 = \frac{h}{2} \left(\operatorname{tg}(\varphi_1) + \frac{\operatorname{tg}(\varphi_2)}{2} \right), \quad (44)$$

где h – длина ячейки, угол $\varphi_1 = (\sqrt{5} - 1)\pi/8$ зафиксирован, а угол $\varphi_2 = \pi/q$ варьируется параметром $q \geq 3$. Все частицы ансамбля расположены изначально в центре канала с равномерным распределением по ширине h_2 , одинаковым модулем скорости и равномерно случайным стартовым направлением.

В результате, в зависимости от параметра q , в канале наблюдается диффузия самого разного характера, например, супердиффузия при $q = 3$, субдиффузия при $q = 4$, и нормальная диффузия (т.е. диффузия с показателем степени $p \approx 1$) при $q = 8$. И действительно, на рис. 8 можно видеть соответствующие этим случаям значения характеристики диффузии $p - 1.27$, 0.75 и 1 .



Следует отметить, что главная проблема этой модели (как и других моделей бильярдного газа), помимо непредсказуемой зависимости результирующего значения характеристики диффузии p от геометрии канала, состоит в невозможности априорного определения наличия и характера комбинированной аномалии, т.е. разделения прыжкового и ловушечного вкладов в итоговое значение p . Однако, как будет показано в дальнейшем, этот вопрос может быть решен при описании возникающих процессов аномальной диффузии на макроуровне (с помощью уравнения аномальной диффузии).

2.2. Результаты вычислительного эксперимента

Вычислительный эксперимент по моделированию пространственно-временной эволюции ансамбля диффундирующих частиц бильярдного газа (рассматривался ансамбль из 20 млн. частиц) проводился для 7 различных конфигураций полигонального канала: $3 \leq q \leq 9$. Моделирование проводилось для полигонального канала размера $-R \leq x \leq R$ с длиной ячейки h в течение времени $0 \leq t \leq T$ с интервалом наблюдений τ . Все частицы ансамбля изначально располагались в центре канала с равномерным распределением по его ширине. Модуль скорости движения всех частиц одинаков и равен $V = R/T$. Стартовое направление движения частицы случайно, все направления равновероятны.

Зеркальное отражение частицы от стенки, расположенной под углом ψ , задаётся формулой $\varphi_{\text{отр}} = 2\pi - \varphi_{\text{над}} + 2\psi$.

Важно отметить следующий аспект. В отличие от классической диффузии, когда имеет место гауссовское распределение концентрации $c(x, t) = C_0 \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$, аномальная диффузия порождается бесконечным множеством других распределений, названных устойчивыми (при $\gamma = 1$) и дробно-устойчивыми (при $\gamma < 1$), которые характеризуются не экспоненциальным, а степенным законом убывания хвостов плотностей (концентрации) на больших расстояниях. Ширина диффузионного пакета дробно-устойчивых распределений растёт со временем пропорционально $t^{\frac{\gamma}{\alpha}}$. При $\alpha < 2\gamma$ имеем супердиффузионный режим, когда ширина диффузионного пакета растёт быстрее, чем в случае нормальной диффузии, а при $\alpha > 2\gamma$ имеем субдиффузионный режим. При $\alpha = 2\gamma$ возникает нормальный режим (при $\alpha = 2$) или квазинормальный (при $\alpha < 2$) [10]. В результате дисперсия (и все высшие моменты) пространственного распределения оказывается бесконечной при любых $\alpha < 2$ безотносительно к γ , и поэтому, строго говоря, не может служить характеристикой ширины диффузионного пакета.

Тем не менее, на практике из-за ограниченности моделируемого физического процесса среднеквадратичное отклонение $\langle \Delta x^2 \rangle(t)$ конечно и даёт в целом верное представление о характере диффузии (см. рис. 8), но далеко не обязательно верно характеризует его количественно (т.е. числом p). Поэтому один из основных вопросов теории аномальной диффузии состоит в идентификации параметров основного уравнения (14) α , γ , D или хотя бы истинного параметра диффузии $p_{\text{ист}} = \frac{2\gamma}{\alpha}$ по результатам полученного распределения концентраций и её динамике. В этом смысле более надёжным способом определения этого параметра в одномерном случае для задачи об источнике представляется оценка скорости убывания максимума полученного распределения, как это предложено в [3]. Поэтому помимо определения

параметров p и D' в зависимости $\langle \Delta x^2 \rangle(t) = D't^p$, по результатам эксперимента вычислялся также порядок диффузии p' по соотношению:

$$p' = -2 \frac{d(\ln[\max_x c(x, t)])}{d(\ln(t))}. \quad (45)$$

По результатам моделирования каждой из 7 конфигураций (были заданы значения $R = 0.5$, $T = 10$, $h = 0.002$, $\tau = 0.01$) полученное число частиц, находящихся в каждой ячейке в каждый момент времени, было отнесено к общему числу частиц в канале, определяя функцию распределения концентрации c'_{in} . По ней были подсчитаны такие ключевые характеристики установившихся диффузионных процессов, как p , D' и p' .

Одним из важных достоинств модели бильярдного газа является тот факт, что искомый режим диффузии p устанавливается очень быстро (см. рис. 8 – уже начиная с момента $T/10$ зависимости почти строго линейные), соответствующие графики зависимости p от t (получаемые как производные от зависимости $\langle \Delta x^2 \rangle \sim t^p$ в логарифмической шкале) быстро устанавливаются к константе.

В результате, числа p , D' и p' , рассчитанные методом наименьших квадратов по точкам последних трёх четвёртых пути ($T/4 \leq t \leq T$) обладали большой степенью достоверности. Особенно это важно в отношении характеристики p' , для расчёта которой используется на порядок меньше числовых данных из c'_{in} и для которой постоянство аномалии на большом интервале времени принципиально. Все эти результаты сведены в таблицу 1.

Табл. 1. Характеристики аномальной диффузии бильярдного газа

q	3	4	5	6	7	8	9
p	1.274	0.727	0.991	1.037	1.083	0.997	1.010
p'	1.338	0.447	0.994	0.997	1.052	0.995	0.969
$D', 10^{-5}$	3.141	0.2812	1.926	3.875	5.861	2.819	1.958

Из этих данных можно сделать следующие первичные выводы.

В канале с $q = 3$ наблюдается сильная супердиффузия, в канале с $q = 4$

проявляется сильная субдиффузия. В канале с $q = 8$, судя по всему, происходит установление к нормальной диффузии, и в каналах с $q = 5$ и $q = 6$ тоже наблюдается диффузия, близкая к нормальной. При значении $q = 7$ наблюдается слабая супердиффузия, а при $q = 9$ – слабая субдиффузия.

2.3. Описание аномальной диффузии бильярдного газа дробно-дифференциальными уравнениями

В данном разделе проведём сравнение результатов расчётов диффузии частиц бильярдного газа в полигональных каналах $3 \leq q \leq 9$, полученных с использованием микромасштабного моделирования (прямое моделирование динамики частиц в канале), и макромасштабного моделирования.

Для описания одномерной аномальной диффузии бильярдного газа в полигональном канале на макроуровне будем использовать дробно-дифференциальное уравнение (14) с подлежащими определению параметрами α , γ , D , диффузия по-прежнему рассматривается на всём одномерном пространстве. Вследствие симметричности моделируемого на микроуровне процесса дробная производная по пространству полагалась равносторонней, т.е. $C_+ = C_- = 1/2$. В качестве начального условия, в соответствии с условиями вычислительного эксперимента, была задана дельта-функция: $c(x, 0) = C_0 \cdot \delta(x)$.

Уравнение аномальной диффузии (14) решалось методом случайного блуждания (20 млн. симуляций) в безразмерных величинах на отрезке $-R \leq x \leq R$ и на интервале $0 \leq t \leq T$ с сеточными параметрами $h = R/K$ и $\tau = T/N$ (заданы значения $R = 0.5$, $T = 10$, $K = 250$, $N = 1000$).

Как уже отмечалось, ключевым моментом является определение параметров дробно-дифференциального уравнения α , γ , D по данным микромасштабного моделирования. С этой целью решалась задача минимизации функции ошибки (по-прежнему, вычисляемая по временному интервалу $T/4 \leq t \leq T$):

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 = \sum_{i=-K}^K \sum_{n=N/4}^N \left(\frac{c'_{in} - c_{in}}{c_{0n}} \right)^2 + (2K + 1) \sum_{n=N/4}^N \left(\frac{c'_{0n} - c_{0n}}{c_{0n}} \right)^2 \quad (46)$$

на множестве значений параметров $1 < \alpha \leq 2, 0 < \gamma \leq 1, D > 0$.

Здесь c'_{in} и c_{in} – сеточные значения концентрации диффундирующих частиц, полученные с использованием микромасштабного моделирования и с помощью численного решения дробно-дифференциального уравнения

соответственно. Ошибка $\varepsilon_1 = \sum_{i=-K}^K \sum_{n=N/4}^N \left(\frac{c'_{in} - c_{in}}{c_{0n}} \right)^2$ оценивает близость решений по

всей пространственно-временной эволюции, ошибка $\varepsilon_2 = (2K + 1) \sum_{n=N/4}^N \left(\frac{c'_{0n} - c_{0n}}{c_{0n}} \right)^2$

оценивает соразмерную ошибку для пары максимумов распределений во времени.

Поиск оптимальных параметров производился с помощью метода Нелдера-Мида в пространстве значений α, γ в сочетании с поиском оптимального значения коэффициента диффузии D методом золотого сечения для каждой такой пары [107].

Краткое описание использованного алгоритма золотого сечения:

1. Пусть $\phi = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$, а искомое значение D^* ищется в интервале $a^{(0)} = 0 < D^* < D_{\max} = \frac{\gamma}{\alpha} \cdot \frac{h^\alpha}{\tau^\gamma} = b^{(0)}$.
2. Тогда следующее уточнение $D^{(i+1)}$ ищется в интервале $(a^{(i)}; b^{(i)})$ как лучшее в смысле критерия (46) между $D_1^{(i+1)} = b^{(i)} - \frac{b^{(i)} - a^{(i)}}{\phi}$ и $D_2^{(i+1)} = a^{(i)} + \frac{b^{(i)} - a^{(i)}}{\phi}$. Если $\varepsilon(\alpha, \gamma, D_1^{(i+1)}) \geq \varepsilon(\alpha, \gamma, D_2^{(i+1)})$, то $a^{(i+1)} = D_1^{(i+1)}, b^{(i+1)} = b^{(i)}$. Если $\varepsilon(\alpha, \gamma, D_1^{(i+1)}) < \varepsilon(\alpha, \gamma, D_2^{(i+1)})$, то $a^{(i+1)} = a^{(i)}, b^{(i+1)} = D_2^{(i+1)}$.
3. Процесс заканчивается, если $\frac{b^{(i)} - a^{(i)}}{b^{(i)}} < ERR < 1$. Тогда $D^* = \frac{a^{(i)} + b^{(i)}}{2}$.

Краткое описание использованного алгоритма Нелдера-Мида:

1. Зададим коэффициенты отражения $k_1 = 1$, сжатия $k_2 = 0.5$ и растяжения $k_3 = 2$. Под y будем понимать тройку чисел (α, γ, D^*) , а под z –

$\varepsilon(\alpha, \gamma, D^*)$. Выберем начальный симплекс (треугольник в пространстве α, γ) как $(y_1^{(0)} = (\alpha_0, \gamma_0, D^*), y_2^{(0)} = (2, \gamma_0, D^*), y_3^{(0)} = (\alpha_0, 1, D^*))$.

2. Выполним сортировку текущих значений $(y_1^{(i)}, y_2^{(i)}, y_3^{(i)})$ по критерию (46): $(y_1^{(i)}, y_2^{(i)}, y_3^{(i)}) = (y_h^{(i)}, y_g^{(i)}, y_l^{(i)}): z_h^{(i)} > z_g^{(i)} > z_l^{(i)}$.

3. Вычислим «центр тяжести» $y_c^{(i)} = \frac{y_g^{(i)} + y_l^{(i)}}{2}$.

4. Выполним отражение y_h относительно y_c с коэффициентом k_1 : $y_r^{(i)} = (1 + k_1)y_c^{(i)} - k_1y_h^{(i)}$.

5. Если $z_l^{(i)} > z_r^{(i)}$, то выполняем растяжение: $y_e^{(i)} = (1 - k_3)y_c^{(i)} + k_3y_r^{(i)}$ (отслеживаем, чтобы не нарушалось $1 < \alpha \leq 2, 0 < \gamma \leq 1$, в противном случае нужным образом уменьшаем k_3), и если $z_e^{(i)} < z_r^{(i)}$, то $y_h^{(i+1)} = y_e^{(i)}, y_g^{(i+1)} = y_g^{(i)}, y_l^{(i+1)} = y_l^{(i)}$, а если $z_e^{(i)} \geq z_r^{(i)}$, то $y_h^{(i+1)} = y_r^{(i)}, y_g^{(i+1)} = y_g^{(i)}, y_l^{(i+1)} = y_l^{(i)}$, переход к п. 9. Если $z_g^{(i)} > z_r^{(i)} > z_l^{(i)}$, то $y_h^{(i+1)} = y_r^{(i)}, y_g^{(i+1)} = y_g^{(i)}, y_l^{(i+1)} = y_l^{(i)}$, переход к п. 9. Если $z_h^{(i)} > z_r^{(i)} > z_g^{(i)}$, то $y_h^{(i)} = y_r^{(i)}, y_r^{(i)} = y_h^{(i)}$ (поменять местами), переход к п. 6. Если $z_r^{(i)} > z_h^{(i)}$, то переход к п. 6.

6. Ситуация $z_r^{(i)} > z_h^{(i)} > z_g^{(i)} > z_l^{(i)}$. Выполняем сжатие: $y_s^{(i)} = (1 - k_2)y_c^{(i)} + k_2y_h^{(i)}$.

7. Если $z_h^{(i)} > z_s^{(i)}$, то $y_h^{(i+1)} = y_s^{(i)}, y_g^{(i+1)} = y_g^{(i)}, y_l^{(i+1)} = y_l^{(i)}$, переход к п. 9.

8. Если $z_s^{(i)} \geq z_h^{(i)}$, то выполняем глобальное сжатие для $(y_h^{(i)}, y_g^{(i)}, y_l^{(i)}) = (y_1^{(i)}, y_2^{(i)}, y_3^{(i)}): y_i^{(i+1)} = y_l^{(i)} + \frac{y_i^{(i)} - y_l^{(i)}}{2}$, переход к п. 9.

9. Проверка сходимости $\frac{z_h^{(i)} - z_l^{(i)}}{z_h^{(i)}} < ERR$, иначе переход к п. 2.

Таким способом были подобраны приблизительные значения параметров α, γ, D уравнения (14) для каждой из семи изученных конфигураций канала $3 \leq q \leq 9$. Все эти параметры, вместе с вычисленными ранее характеристиками p, D' и p' , приведены в табл. 2. Параметр p'' в таблице представляет собой порядок диффузии, вычисленный по убыванию максимума решения уравнения,

что позволяет отследить наличие или отсутствие эффекта, упомянутого в формуле (43). Результаты сравнения решений дробно-дифференциального уравнения и данных микромасштабного моделирования приведены далее на рис. 9-15. Для всех рассмотренных вариантов решение каждого полученного уравнения аномальной диффузии достаточно точно описывает пространственно-временную эволюцию диффундирующих частиц в соответствующем полигональном канале.

Табл. 2. Параметры и характеристики диффузии в полигональных каналах

<i>Характеристики диффузии бильярдного газа в канале</i>				<i>Параметры выбранного уравнения аномальной диффузии</i>				
<i>q</i>	<i>p</i>	<i>p'</i>	<i>$D', 10^{-5}$</i>	<i>α</i>	<i>γ</i>	<i>$D, 10^{-5}$</i>	<i>$2\gamma/\alpha$</i>	<i>p''</i>
3	1.274	1.338	3.141	1.341	0.952	58.65	1.420	1.278
4	0.727	0.447	0.2812	1.984	0.478	0.3283	0.482	0.447
5	0.991	0.994	1.926	1.948	0.968	1.195	0.994	1.012
6	1.037	0.997	3.875	1.950	0.959	2.579	0.984	0.990
7	1.083	1.052	5.861	1.893	0.997	5.088	1.053	1.049
8	0.997	0.995	2.819	1.988	0.996	1.439	1.002	1.003
9	1.010	0.969	1.958	1.988	0.962	1.138	0.968	0.982

В итоге, по результатам всего вычислительного эксперимента можно выделить следующие характерные режимы диффузии, наблюдаемые в полигональном канале для бильярдного газа при различных значениях параметра q .

В канале с $q = 3$ наблюдается установление к сильной супердиффузии с порядком $p' \approx 1.338$. Диффузионный процесс в этом случае хорошо описывается уравнением (14) с параметрами $\alpha \approx 1.341$, $\gamma \approx 0.952$ и $D \approx 5.865 \cdot 10^{-4}$ (рис. 9). В данном случае в канале имеются возможности как для прострельного движения частиц ($\alpha < 2$), так и для попадания частиц в ловушки ($\gamma < 1$), однако преобладающей оказывается первая тенденция.

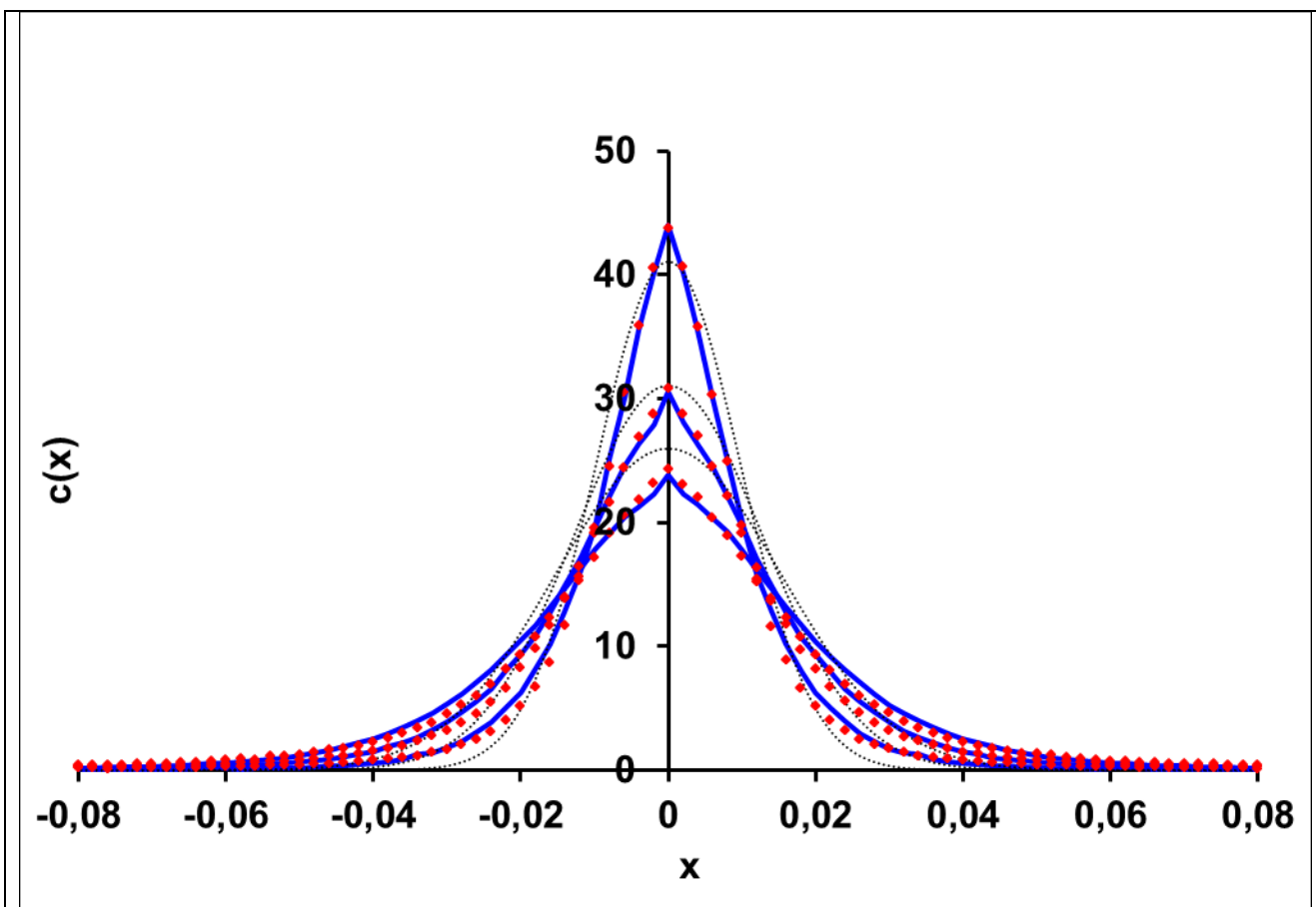


Рис. 9. Распределение концентрации диффундирующих частиц для $q = 3$ (сплошная кривая) и решение уравнения (выделено маркерами) в моменты времени $t = 0.4T$, $t = 0.7T$ и $t = T$ (пунктирная кривая отражает распределение Гаусса)

В канале с $q = 4$ наблюдается установление к сильной субдиффузии с порядком $p' \approx 0.447$. Этот вариант описывается уравнением (14) с параметрами $\alpha \approx 1.984$, $\gamma \approx 0.478$ и $D \approx 3.283 \cdot 10^{-6}$ (рис. 10), хотя следует отметить, что из-за сильной аномалии это решение имеет ошибку больше всех остальных.

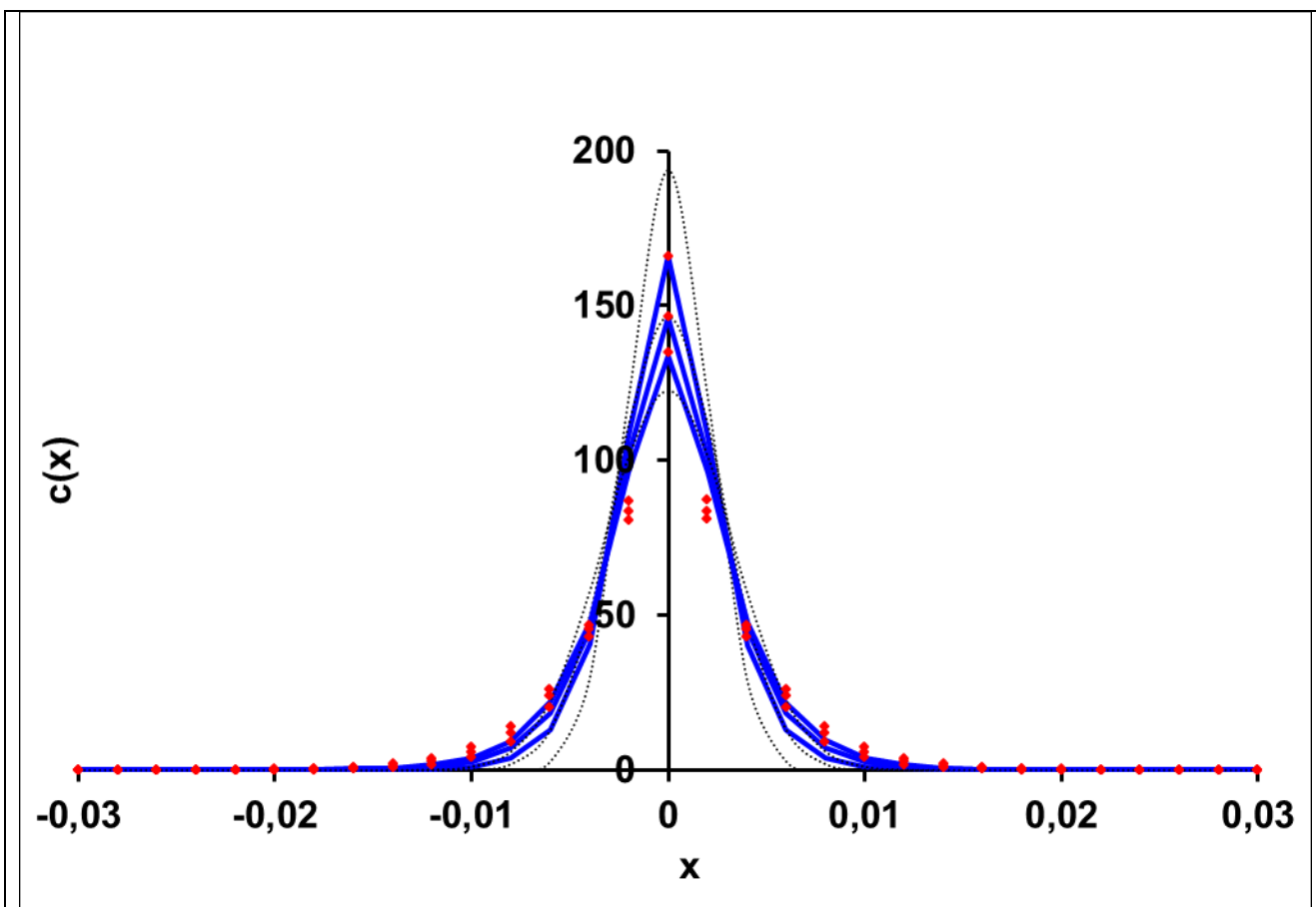


Рис. 10. Распределение концентрации диффундирующих частиц для $q = 4$ (сплошная кривая) и решение уравнения (выделено маркерами) в моменты времени $t = 0.4T$, $t = 0.7T$ и $t = T$ (пунктирная кривая отражает распределение Гаусса)

В канале с $q = 5$ наблюдается диффузия, близкая к нормальной (рис. 11).

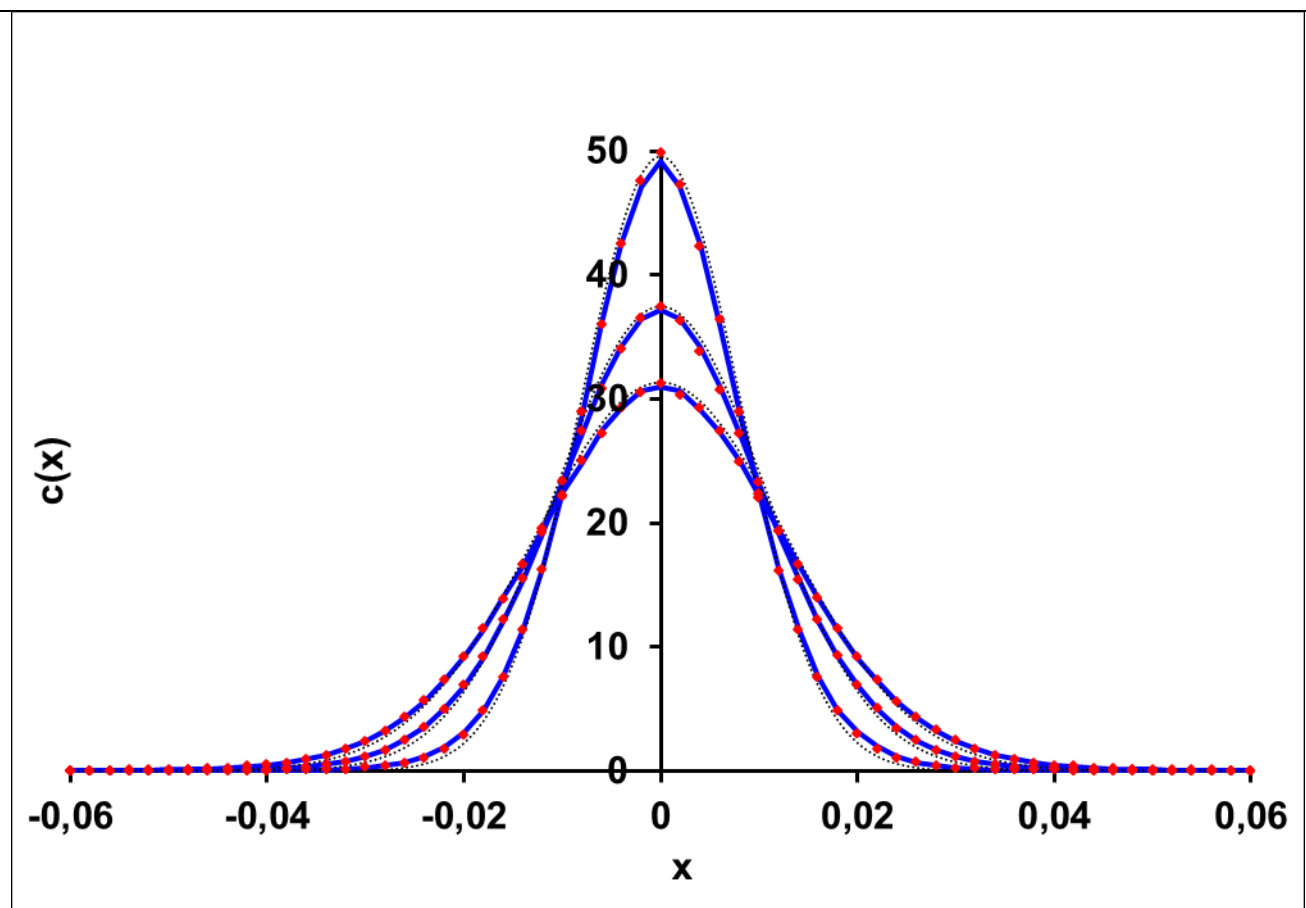


Рис. 11. Распределение концентрации диффундирующих частиц для $q = 5$ (сплошная кривая) и решение уравнения (выделено маркерами) в моменты времени $t = 0.4T$, $t = 0.7T$ и $t = T$ (пунктирная кривая отражает распределение Гаусса)

В канале с $q = 6$ наблюдается диффузия, близкая к нормальной (рис. 12).

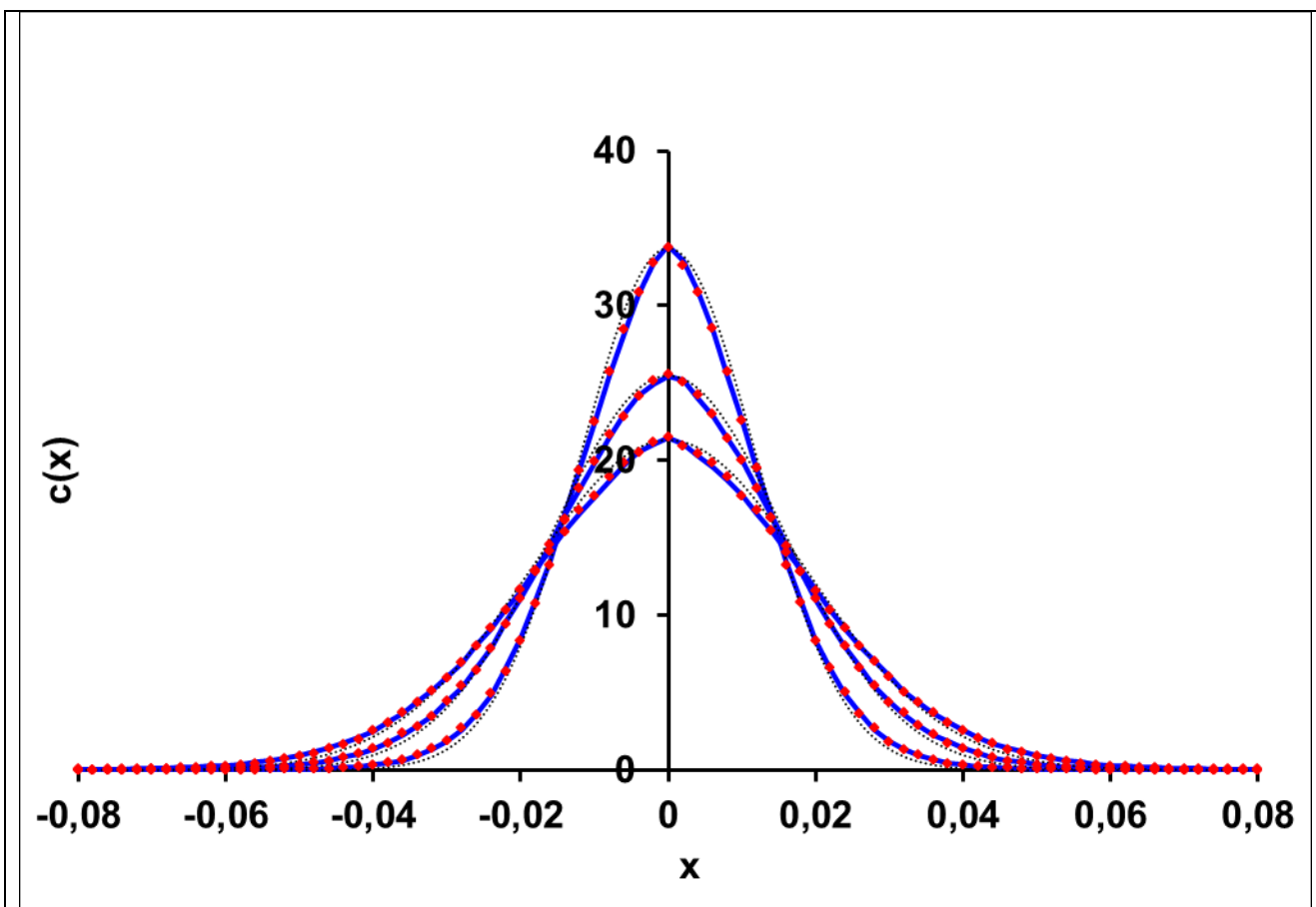


Рис. 12. Распределение концентрации диффундирующих частиц для $q = 6$ (сплошная кривая) и решение уравнения (выделено маркерами) в моменты времени $t = 0.4T$, $t = 0.7T$ и $t = T$ (пунктирная кривая отражает распределение Гаусса)

В канале с $q = 7$ наблюдается слабая супердиффузия (рис. 13).

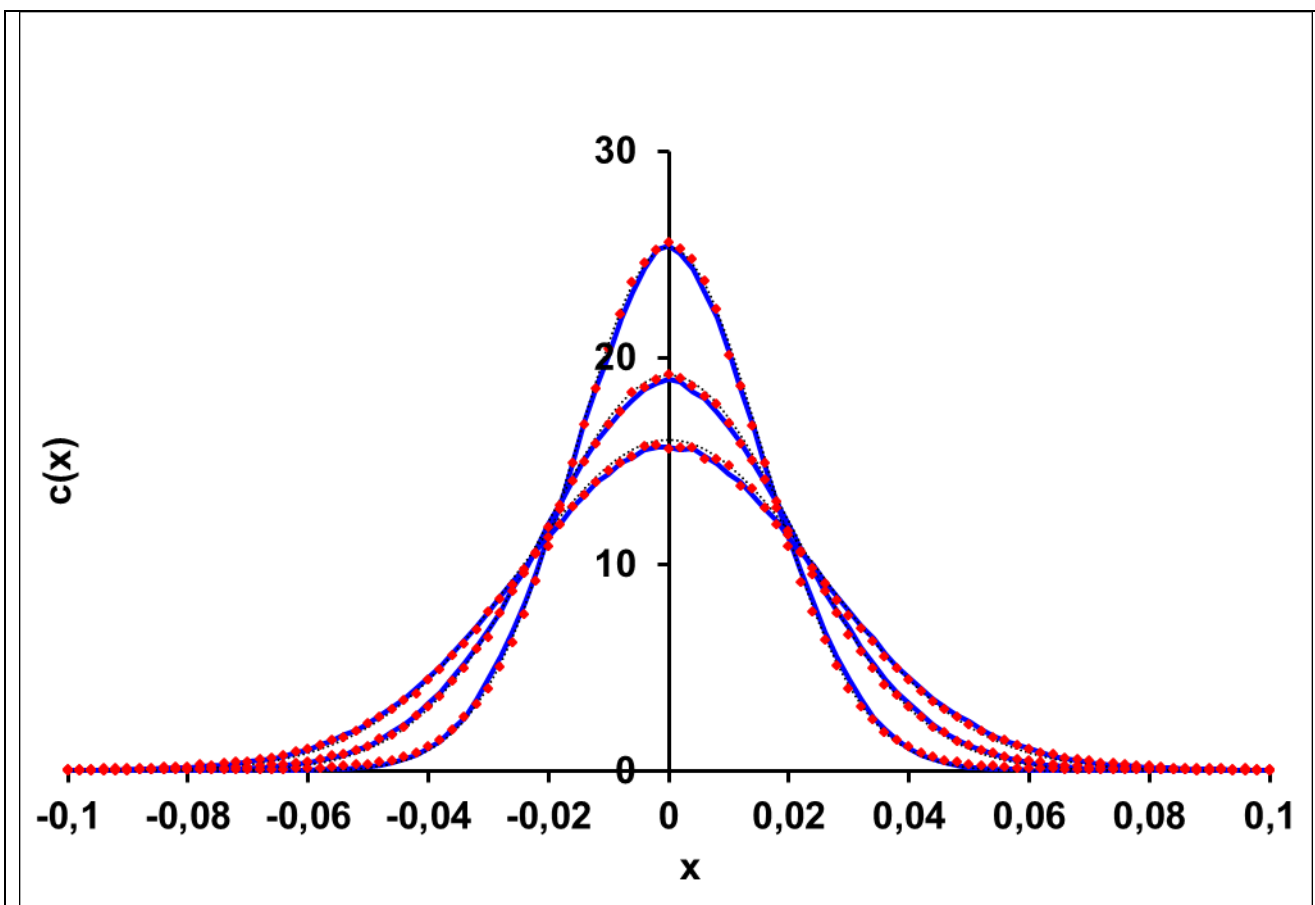


Рис. 13. Распределение концентрации диффундирующих частиц для $q = 7$ (сплошная кривая) и решение уравнения (выделено маркерами) в моменты времени $t = 0.4T$, $t = 0.7T$ и $t = T$ (пунктирная кривая отражает распределение Гаусса)

В канале с $q = 8$ наблюдается установление к режиму, близкому к нормальной диффузии с $p' \approx 1$. Полученные параметры уравнения (14) следующие: $\alpha \approx 1.988$, $\gamma \approx 0.996$ и $D \approx 1.439 \cdot 10^{-5}$, распределения концентрации близки к распределению Гаусса (рис. 14). Следует также отметить, что для этого случая достаточно точно выполняется равенство классической диффузии $D' = 2 \cdot D$, что служит лишним подтверждением этого. Для всех других случаев эта зависимость сложнее и $D' < 2 \cdot D$.

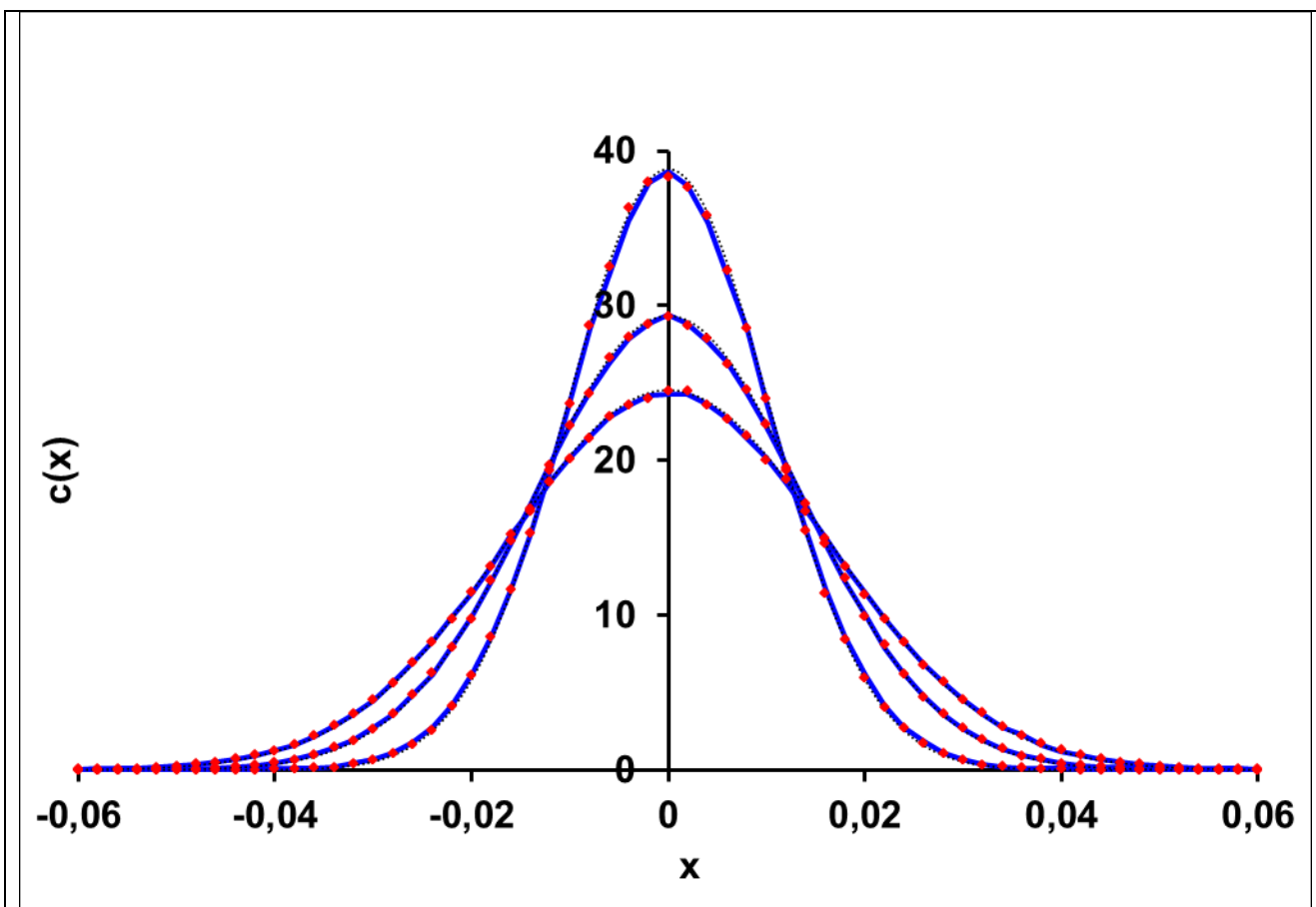


Рис. 14. Распределение концентрации диффундирующих частиц для $q = 8$ (сплошная кривая) и решение уравнения (выделено маркерами) в моменты времени $t = 0.4T$, $t = 0.7T$ и $t = T$ (пунктирная кривая отражает распределение Гаусса)

В канале с $q = 9$ наблюдается слабая субдиффузия (рис. 15).

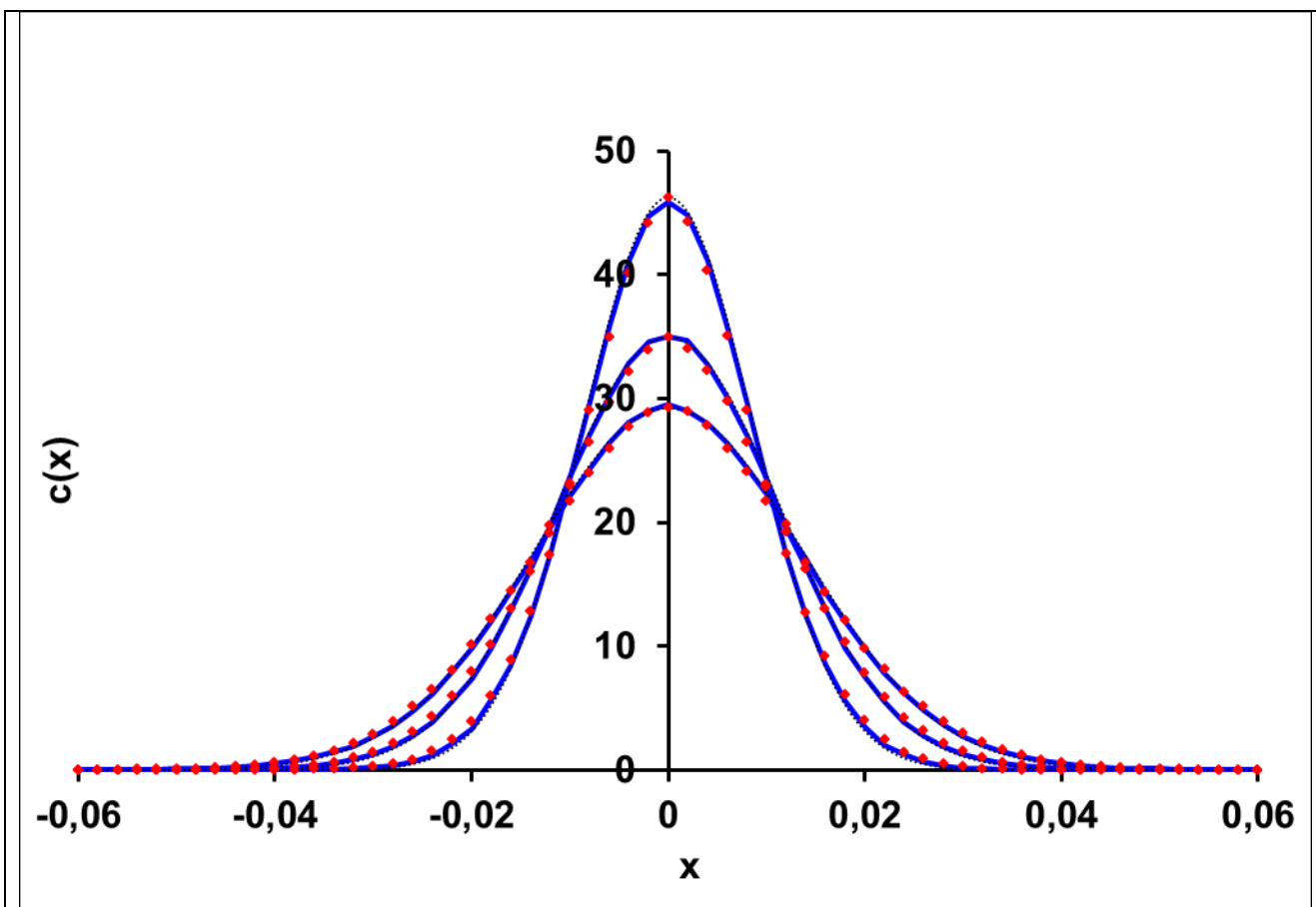


Рис. 15. Распределение концентрации диффундирующих частиц для $q = 9$ (сплошная кривая) и решение уравнения (выделено маркерами) в моменты времени $t = 0.4T$, $t = 0.7T$ и $t = T$ (пунктирная кривая отражает распределение Гаусса)

Таким образом, теперь можно дать окончательный ответ о характере аномалий (выраженном значениями α и γ), возникших в канале каждой конфигурации. Во всех рассмотренных случаях $3 \leq q \leq 9$ наблюдалась именно комбинированная аномалия (т.е. и $\alpha < 2$, и $\gamma < 1$). Особый интерес представляет тот факт, что даже диффузия с показателем степени $p \approx 1$ (случаи $q = 5$ и 6), судя по всему, не является классической, а представляет собой сбалансированную комбинированную аномалию, т.е. является квазинормальной.

Полученные результаты также хорошо согласуются с известной теоретической зависимостью $p = \frac{2\gamma}{\alpha}$. При этом окончательно ясно, что соответствие показателя степени p и пары параметров (α, γ) не является

взаимно однозначным, и одному и тому же значению p соответствует бесконечное количество комбинаций параметров α и γ уравнения (14), описывающих разные механизмы проявления аномальности. Отметим также, что все полученные распределения с $\gamma < 1$ отличаются присутствием в точке максимума концентрации недифференцируемого пика, что подтверждает теоретический результат. Причём, это имеет место как в режиме субдиффузии (рис. 10), так и в режиме супердиффузии (рис. 9).

Выводы к главе 2

Во второй главе были исследованы процессы диффузии бильярдного газа в полигональных каналах, по результатам чего можно сделать следующие выводы:

1. Результаты прямого дискретно-элементного (микроскопического) моделирования диффузии бильярдного газа в полигональных каналах свидетельствуют о том, что рассматриваемые процессы проявляют аномальный характер, зависящий от конфигурации канала бильярдного газа.
2. Получаемые распределения концентрации частиц могут быть достаточно точно описаны на макроуровне с использованием дробно-дифференциального уравнения (14) – уравнения аномальной диффузии.
3. На основе классических методов оптимизации были предложены алгоритмы идентификации параметров уравнения аномальной диффузии по данным дискретно-элементного моделирования, что позволило связать микроскопический и макроскопический подходы.
4. Для различных конфигураций каналов бильярдного газа определены параметры соответствующих дробно-дифференциальных уравнений, в результате чего выявлены механизмы проявления комбинированной аномалии, т.е. проведено разделение вкладов прыжкового и ловушечного механизмов в итоговый характер диффузии.

3. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АНОМАЛЬНОЙ ДИФФУЗИИ В СРЕДАХ С НЕОДНОРОДНОЙ СТРУКТУРОЙ

Далее в настоящей работе рассматривается развитие микромасштабного подхода к описанию процессов аномальной диффузии (в сочетании с описанием на макроуровне). Как и прежде, предполагается численное моделирование столкновительной динамики представительного ансамбля независимых диффундирующих частиц, и осреднение соответствующих параметров по ансамблю позволяет рассчитать макроскопические величины и сопоставить полученные данные с результатами решения дробно-дифференциального уравнения (14).

3.1. Дискретно-элементная модель среды с неоднородной структурой

Как показывают физические эксперименты по наблюдению диффузионных процессов в твёрдых телах, у различных классов материалов наблюдаются каналы ускоренной диффузии (по границам зёрен и дислокациям) [80]. Действительно, в отличие от жидкостей и газов, в кристаллических твёрдых телах реализуется несколько структурно различных каналов, по которым может проходить диффузия атомов. Помимо объёмной диффузии по решётке, возможна диффузия по поверхности, контролируемая различными атомными дефектами, и частоты атомных скачков вдоль дислокаций, границ зёрен и на свободных поверхностях много выше, чем в решётке, что приводит к возникновению супердиффузии. Более того, существуют кинетические процессы, которые ограничены каналами ускоренной диффузии. Например, диффузия по границам зёрен в поликристаллических материалах играет ключевую роль при температурах ниже 0.6 от температуры плавления. Эти соображения легли в основу для следующего подхода.

Будем использовать модель диффузионного переноса, согласно которой перемещение диффундирующих частиц осуществляется вследствие взаимодействия с окружающей средой и с границами области. Диффузия по-прежнему рассматривается в узкой, бесконечной в продольном направлении

двумерной области (x, y) , ограниченной по ширине зеркально отражающими стенками (канал с шириной H). Окружающая среда описывается расположением и динамикой её структурных элементов (СЭ), т.е. частиц среды. Предполагается, что частицы среды создают потенциальное силовое поле.

В исследуемой модели используется потенциал Леннарда-Джонса:

$$\Phi(r) = 4E \cdot \left[\left(\frac{d}{r} \right)^{12} - \left(\frac{d}{r} \right)^6 \right], \quad (47)$$

где r – расстояние от диффундирующей частицы до структурного элемента среды, E и d – параметры потенциала (глубина потенциальной ямы и точка нулевого потенциала).

Соответственно, с каждым СЭ частица взаимодействует с силой, модуль которой равен:

$$F(r) = -\frac{d\Phi(r)}{dr} = \frac{24E}{d} \cdot \left[2\left(\frac{d}{r} \right)^{13} - \left(\frac{d}{r} \right)^7 \right]. \quad (48)$$

Равновесное расстояние (точка равенства нулю силы) $r_0 = 2^{1/6} d$.

Слагаемое $\sim 1/r^{12}$ описывает отталкивание атомов, когда они приближаются друг к другу, а слагаемое $\sim 1/r^6$, доминирующее при $r > r_0$, описывает притяжение атомов и ответственно за связь в системе. Потенциал Леннарда-Джонса часто используется для изучения общих закономерностей поведения систем, когда требуется скорее качественное, чем количественное описание взаимодействия.

Также в модели используется радиус усечения $r_{yc} = 5 \cdot d$, т.е. считается, что на достаточно больших расстояниях диффундирующая частица и СЭ не взаимодействуют.

Как и прежде, диффундирующие частицы движутся в данном силовом поле, не оказывая влияния друг на друга.

Рассматривались четыре типа (Q) начального расположения структурных элементов среды (их поле строится заново для каждой отдельной симуляции):

Тип 0: регулярное – с постоянными заданными интервалами по пространству (по длине h_x и ширине h_y), расположение СЭ зафиксировано и

симметрично относительно оси x в канале;

Тип 1: квазирегулярное – с постоянными заданными интервалами по пространству (по длине h_x и ширине h_y), но со случайным общим смещением

$-\frac{h_x}{2} \leq \Delta x \leq \frac{h_x}{2}, -\frac{h_y}{2} \leq \Delta y \leq \frac{h_y}{2}$ всего поля СЭ относительно оси x в канале;

Тип 2: квазислучайное – со случайным смещением в рамках своей области $-\frac{h_x}{2} \leq \Delta x \leq \frac{h_x}{2}, -\frac{h_y}{2} \leq \Delta y \leq \frac{h_y}{2}$ каждого СЭ относительно своего регулярного расположения;

Тип 3: случайное – когда структурные элементы среды распределены во всей исследуемой области абсолютно случайно с заданными средними межчастичными расстояниями по обеим координатам h_x и h_y , т.е. известно только общее их число в области.

Очевидно, что в рамках одномерности модели для реализации активной роли стенки ширина канала H не должна превышать пространственный интервал по ширине h_y больше, чем в несколько раз (например, $[H / h_y] \leq 10$).

Также предполагается, что движение СЭ независимо, т.е. их масса много больше массы диффундирующих частиц, что позволяет считать их не подверженными заметному обратному взаимодействию, т.е. неподвижными (неизменное во времени расположение в канале).

Кроме неподвижного состояния СЭ также возможны, но не рассматривались подробно в рамках данной работы другие варианты динамики структурных элементов среды (независимые от их начального расположения):

1) случайное ограниченное перемещение в окрестности своего базового положения на заданный интервал через каждый заданный промежуток времени;

2) полная перестройка расположения частиц с течением времени – через каждый заданный промежуток времени расположение частиц среды определяется заново по тому же правилу, что и начальное.

В любом случае, потенциальное силовое поле использовалось только с целью определения направления движения частицы, а её кинетическая энергия

поддерживалась постоянной и равной стартовой $\frac{mV_0^2}{2}$. Вследствие такой нормировки скорость диффузии сохраняется постоянной, а конкретные значения массы частицы m и параметра потенциала E не влияют принципиально на итоговую диффузионную картину и могут быть приняты некими константами.

Тем не менее, для полноты картины следует отметить и возможные варианты зависимой динамики СЭ:

3) расположение частиц среды меняется только при взаимодействии с диффундирующей частицей (т.е. на расстояниях $r \leq r_{yc} = 5 \cdot d$) в соответствии с третьим законом Ньютона;

4) кроме п. 3, СЭ ещё и взаимодействуют между собой – в своём потенциальном поле Леннарда-Джонса, т.е. со своими параметрами E' и d' .

Эти варианты являются предметом будущих исследований.

Кроме того, в моделируемой среде реализована активная роль стенки канала. В канале предполагается возможность случайного захвата диффундирующей частицы стенкой с последующим высвобождением. Последнее представляет собой модель ловушки, характеризующейся двумя параметрами: вероятностью η ($0 \leq \eta \leq 1$) попадания частицы в ловушку при каждом касании стенки (случай $\eta = 0$ означает отсутствие ловушки) и характерным числом μ ($\mu \geq 0$). После высвобождения из ловушки диффундирующая частица продолжает движение как при зеркальном отражении от стенки.

Ловушка может быть одного из двух типов.

Экспоненциальная ловушка определяется вероятностью μ ($0 \leq \mu \leq 1$) выхода частицы из ловушки за интервал времени τ , т.е. освобождение частицы в непрерывном времени описывается экспоненциальным законом распределения с интенсивностью $\nu = -\frac{\ln(1-\mu)}{\tau}$. Его функция распределения

$$F(t) = 1 - e^{-\nu t} = 1 - (1 - \mu)^{t/\tau}, \text{ а плотность вероятностей } f(t) = \nu e^{-\nu t} = \frac{\ln(1-\mu)}{\tau} (1 - \mu)^{t/\tau}.$$

В дискретном времени вычислительного эксперимента $t = n \cdot \tau$ экспоненциальная ловушка ($n \geq 1$ – число τ -тактов в ловушке) описывается геометрическим законом распределения с вероятностью «успеха» μ , функцией распределения (вероятность выйти из ловушки к шагу n) $F(n) = 1 - (1 - \mu)^{n-1}$ и законом распределения вероятностей (шанс выйти из ловушки на шаге n):

$$f(n) = \mu(1 - \mu)^{n-1}. \quad (49)$$

Главная особенность этих распределений – отсутствие памяти, т.е. время, которое ещё придётся прождать частице до выхода из ловушки, не зависит от времени, уже там проведённого. Случай $\mu = 0$ приводит к «вечной» ловушке, при $\mu = 1$ ловушечный эффект не заметен.

Степенная ловушка определяется параметром μ ($\mu > 1$), при котором сходится ряд Дирихле (обобщённый гармонический ряд) $\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{\mu}}$. Сумма этого ряда есть дзета-функция Римана: $\zeta(\mu) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{\mu}}$. В этом случае закон распределения вероятностей (шанс выйти из ловушки на шаге n) может быть задан как:

$$f(n) = \frac{1}{\zeta(\mu)n^{\mu}}, \quad (50)$$

тогда будет выполнено условие нормировки $\sum_{n=1}^{\infty} f(n) = 1$. В отличие от экспоненциальных ловушек, степенные уже обладают эффектом памяти.

В результате, введённый параметр μ будет определять и тип, и конкретный вариант ловушки.

3.2. Особенности вычислительного эксперимента

Моделирование пространственно-временной эволюции ансамбля диффундирующих частиц проводится путём численного интегрирования уравнения движения диффундирующей частицы в двумерном пространстве $\vec{r} = (x, y)$ в потенциальном поле всех СЭ в пределах радиуса усечения:

$$m\vec{a} = \sum_{r_i < r_{yc}} \vec{F}_i(\vec{r}_i), \vec{a} = \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}, \quad (51)$$

или, после проецирования на оси, системой уравнений:

$$\begin{cases} m \frac{d^2 x}{dt^2} = \sum_{r_i < r_{yc}} F_i(r_i) \frac{x_i}{r_i} \\ m \frac{d^2 y}{dt^2} = \sum_{r_i < r_{yc}} F_i(r_i) \frac{y_i}{r_i} \\ F(r_i) = \frac{24E}{d} \cdot \left[2 \left(\frac{d}{r_i} \right)^{13} - \left(\frac{d}{r_i} \right)^7 \right] \\ r_i = \sqrt{x_i^2 + y_i^2} \end{cases}, \quad (52)$$

где под x_i и y_i подразумевается разность текущих координат структурного элемента среды № i и диффундирующей частицы.

Эффект ловушки моделируется в соответствии с формулами (49) и (50), т.е. при каждом попадании частицы в ловушку сразу вычисляется время её пребывания там.

Зеркальное отражение от стенки задаётся формулой $\varphi_{опр} = 2\pi - \varphi_{над}$.

Вычислительный эксперимент проводился для канала размера $-R \leq x \leq R$ с шагом наблюдений h в течение времени $0 \leq t \leq T$ с интервалом наблюдений τ . Временной такт для интегрирования уравнений движения (52) фиксирован: $\tau_0 = 0.01, \tau = m\tau_0, m \geq 1$. Постоянные параметры для уравнений (52): $m = 1$, $d = 0.001$, $E = 0.001$. Кроме того, в вычислениях, чтобы избежать случайных огромных ускорений, использовалось понятие радиуса СЭ, т.е. минимального расстояния, на которое может приблизиться частица: $r_{min} = 0.0001$.

Расстояния между СЭ брались одинаковыми по длине и ширине и измерялись в единицах d : $h_x = h_y = \lambda d, \lambda > 0$. Ширина канала H задавалась в единицах h_y дискретным параметром числа рядов СЭ в канале B : $H = Bh_y = B\lambda d, B \geq 1$.

Все частицы ансамбля изначально располагались в центре канала $x = 0$ с равномерным распределением по его ширине $-\frac{H}{2} \leq y \leq \frac{H}{2}$. Модуль скорости

движения всех диффундирующих частиц одинаков, постоянен и равен $V_0 = 0.05$. Стартовое направление движения частицы случайно, все направления равновероятны (равномерно распределены в диапазоне от 0 до 2π).

Кроме того, важно отметить, что для корректности эксперимента диффундирующая частица должна иметь достаточный стартовый запас кинетической энергии, чтобы преодолеть потенциальную яму возле структурного элемента среды и иметь возможность улететь сколь угодно далеко от неё, т.е. должно выполняться условие: $\frac{mV_0^2}{2} \geq E$.

Для удобства дальнейшего согласования с макроскопической моделью и стандартизации объёма числовых данных были зафиксированы дискретные параметры числа наблюдений $N = 2000$ и дальности наблюдения за диффузией в канале $K = 250$. Соответственно, нужное время наблюдения за диффузией изменялось параметром m : $T = N\tau = N\tau_0 m = 20m$, а требуемые размеры канала менялись пропорционально как $R = Kh = KV_0\tau = KV_0\tau_0 m$, т.е. шаг наблюдений $h = V_0\tau = V_0\tau_0 m$ тоже был переменным.

Подводя итоги описания моделируемой среды, следует отдельно выделить основные варьируемые параметры модели: тип расположения СЭ Q , расстояние между СЭ λ , число рядов СЭ в канале B и параметры ловушки η и μ .

Вычислительный эксперимент проводился для нескольких серий задач, каждая из которых (всего 51) характеризуется набором $(Q, \lambda, B, \eta, \mu)$ и отличается от других значением одного из параметров модели, а также, возможно, временем наблюдения m и числом симуляций k .

По результатам моделирования для каждого рассмотренного варианта полученное число частиц, находящихся в каждой ячейке в каждый момент времени, было отнесено к общему числу частиц k в канале, определяя функцию распределения концентрации c'_{in} . По ней затем подсчитывались характеристики установившихся диффузионных процессов p , D' и p' по соотношениям

$$\langle \Delta x^2 \rangle(t) = D't^p \text{ и } p' = -2 \frac{d(\ln[\max_x c(x,t)])}{d(\ln(t))}.$$

Одним из основных недостатков описанной модели является тот факт, что искомый режим диффузии p устанавливается очень медленно, и для обработки обычно пригодна лишь меньшая часть зависимости $c'(t)$. Кроме того, вследствие возросшего времени T и ощутимого увеличения алгоритмической сложности самого процесса, вычисления проводятся гораздо медленнее, чем в случае бильярдного газа, а меньшее значение k увеличивает зашумлённость полученного решения. В результате, характеристика p' оказывается крайне нестабильной и из-за огромного разброса значений практически неприменимой. На практике числа p и D' после построения зависимости среднеквадратичного смещения частиц от времени $\langle \Delta x^2 \rangle(t)$ рассчитывались методом наименьших квадратов по точкам последней четверти пути ($\frac{3}{4}T \leq t \leq T$).

Для описания возникающей диффузии на макроуровне по-прежнему будем использовать дробно-дифференциальное уравнение (14) с варьируемыми параметрами α , γ , D . Вследствие симметричности моделируемого на микроуровне процесса дробная производная по пространству полагается равносторонней, т.е. $C_+ = C_- = \frac{1}{2}$ (поиск моделей для перекошенного случая $C_+ \neq C_-$ остаётся открытой задачей). В качестве начального условия, в соответствии с условиями вычислительного эксперимента, задаётся дельта-функция: $c(x, 0) = C_0 \cdot \delta(x)$.

Уравнение аномальной диффузии (14) решалось методом случайного блуждания (20 млн. симуляций) в безразмерных величинах с теми же параметрами, т.е. на отрезке $-R \leq x \leq R$ и на интервале $0 \leq t \leq T$ с $N = 2000$ и $K = 250$ и сеточными параметрами $h = R/K$ и $\tau = T/N$.

Подбор параметров уравнения (14) по данным микромасштабного моделирования из-за переменного режима диффузии p также затруднён и требует гораздо больше эвристических элементов в сравнении картины распределения диффундирующих частиц в эксперименте с решением соответствующего дробно-дифференциального уравнения.

Тем не менее, для всех задач были подобраны приблизительные значения

параметров α , γ , D уравнения (14), приведённые в соответствующих таблицах. Результаты сравнения решений дробно-дифференциального уравнения и данных микромасштабного моделирования приведены на рисунках в соответствующих разделах. Для всех рассмотренных вариантов решение уравнения аномальной диффузии с подобранными параметрами достаточно точно описывает пространственно-временную эволюцию диффундирующих частиц в канале, по крайней мере, в моменты времени $\frac{3}{4}T \leq t \leq T$.

Кроме того, не лишне отметить тот факт, что параметр скорости V_0 влияет только на наблюдаемый коэффициент диффузии D' , причем зависимость эта, судя по всему, имеет вид $D' \sim V_0^p$.

С учётом всего вышеизложенного, перейдём к описанию результатов, полученных в разных сериях вычислительного эксперимента путём расчёта пространственно-временной эволюции представительного ансамбля частиц (не менее 200 000 симуляций).

3.3. Механизмы появления пространственной аномалии

Основной механизм появления аномальной диффузии по пространству демонстрирует следующая серия задач. В ней исследуется диффузия в канале без ловушек с одним рядом СЭ регулярной структуры расположения ($Q = 0$, $B = 1$, $\eta = 0$, $\mu = 1$) в зависимости от расстояния λ между СЭ (см. табл. 3).

Табл. 3. Параметры и характеристики диффузии в зависимости от расстояния λ между СЭ для регулярной структуры без ловушек

<i>Параметры задачи</i>			<i>Характеристики диффузии</i>		<i>Параметры уравнения аномальной диффузии</i>			
λ	m	k	p	D'	α	γ	D	$2\gamma/\alpha$
4	4	10^6	1.00	$8.49 \cdot 10^{-5}$	2	1	$4.34 \cdot 10^{-5}$	1.00
9	6	10^6	1.00	$7.06 \cdot 10^{-4}$	2	1	$3.58 \cdot 10^{-4}$	1.00
16	8	10^6	1.05	$2.33 \cdot 10^{-3}$	1.96	1	$1.34 \cdot 10^{-3}$	1.02
25	10	10^6	1.08	$4.99 \cdot 10^{-3}$	1.94	1	$3.34 \cdot 10^{-3}$	1.03
36	12	10^6	1.10	$8.84 \cdot 10^{-3}$	1.92	1	$6.78 \cdot 10^{-3}$	1.04
49	14	10^6	1.12	$1.41 \cdot 10^{-2}$	1.90	1	$1.21 \cdot 10^{-2}$	1.05
64	16	10^6	1.15	$1.99 \cdot 10^{-2}$	1.88	1	$1.88 \cdot 10^{-2}$	1.06

По этим результатам можно выделить следующие типичные режимы диффузии в рассматриваемой системе.

Режим нормальной диффузии наблюдается при умеренном расстоянии между частицами среды ($\lambda \leq 10$). В этом случае у частиц нет возможности преодолевать большие расстояния (больше λd), не испытывая взаимодействия с СЭ. Например, при $\lambda = 9$ прямое моделирование дает $p \approx 1$. Соответственно, процесс хорошо описывается классическим уравнением диффузии (рис. 16).

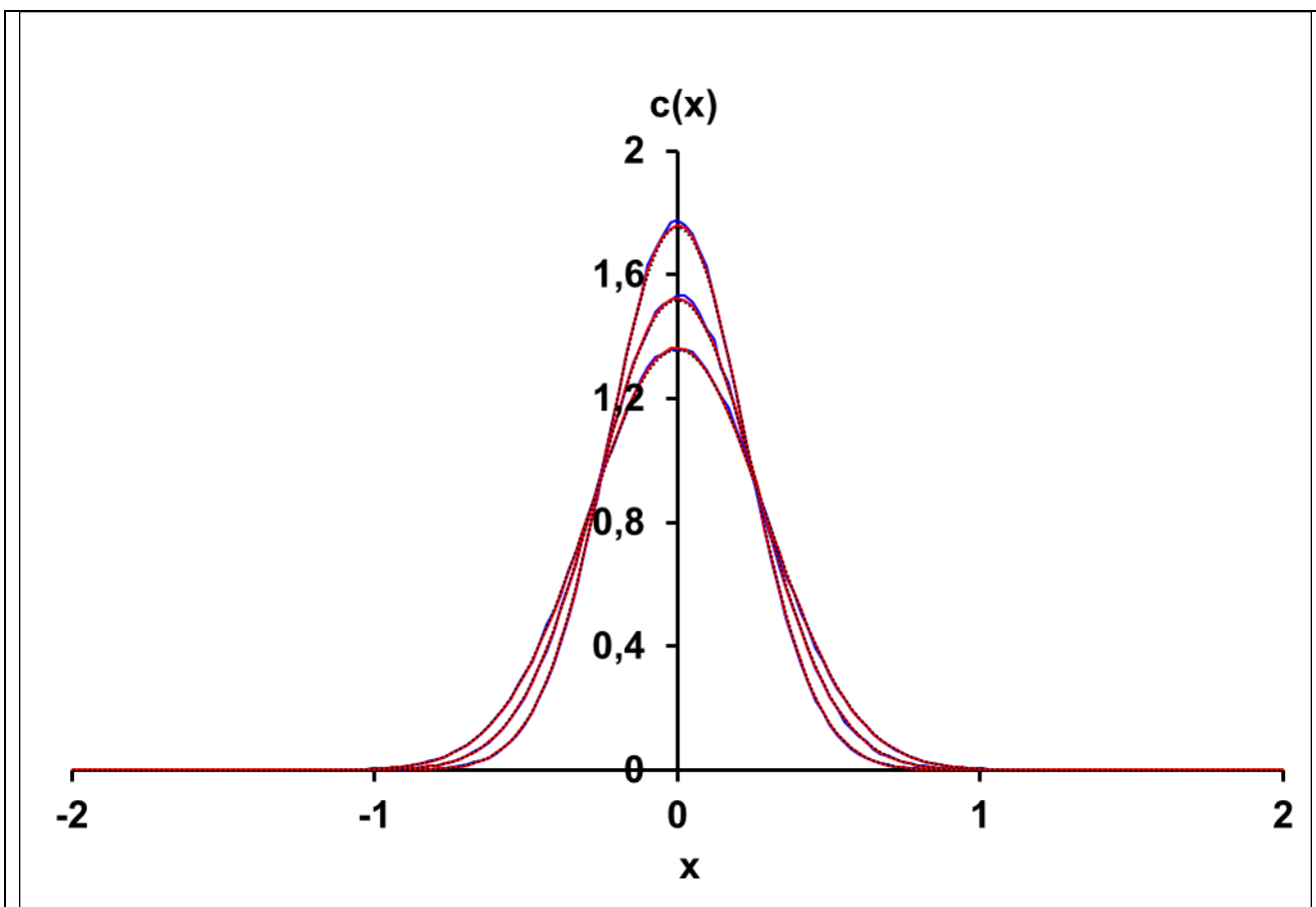


Рис. 16. Распределение концентрации диффундирующих частиц для $\lambda = 9$ (синяя кривая) и решение уравнения (красная кривая) в моменты времени $t = 0.6T$, $t = 0.8T$ и $t = T$

В случае более разреженной среды ($\lambda > 10$) в канале появляются «прострельные» области, при движении частицы в которых их взаимодействие со структурными элементами среды пренебрежимо мало, т.е. частицы движутся равномерно и прямолинейно. Наличие таких областей, позволяющих преодолевать большие расстояния в баллистическом режиме, приводит к супердиффузии. Например, в варианте $\lambda = 25$ прямое моделирование дает $p \approx 1.08$. Этот процесс можно описать уравнением (14) с дробной производной по пространству порядка $\alpha = 1.94$ (рис. 17).

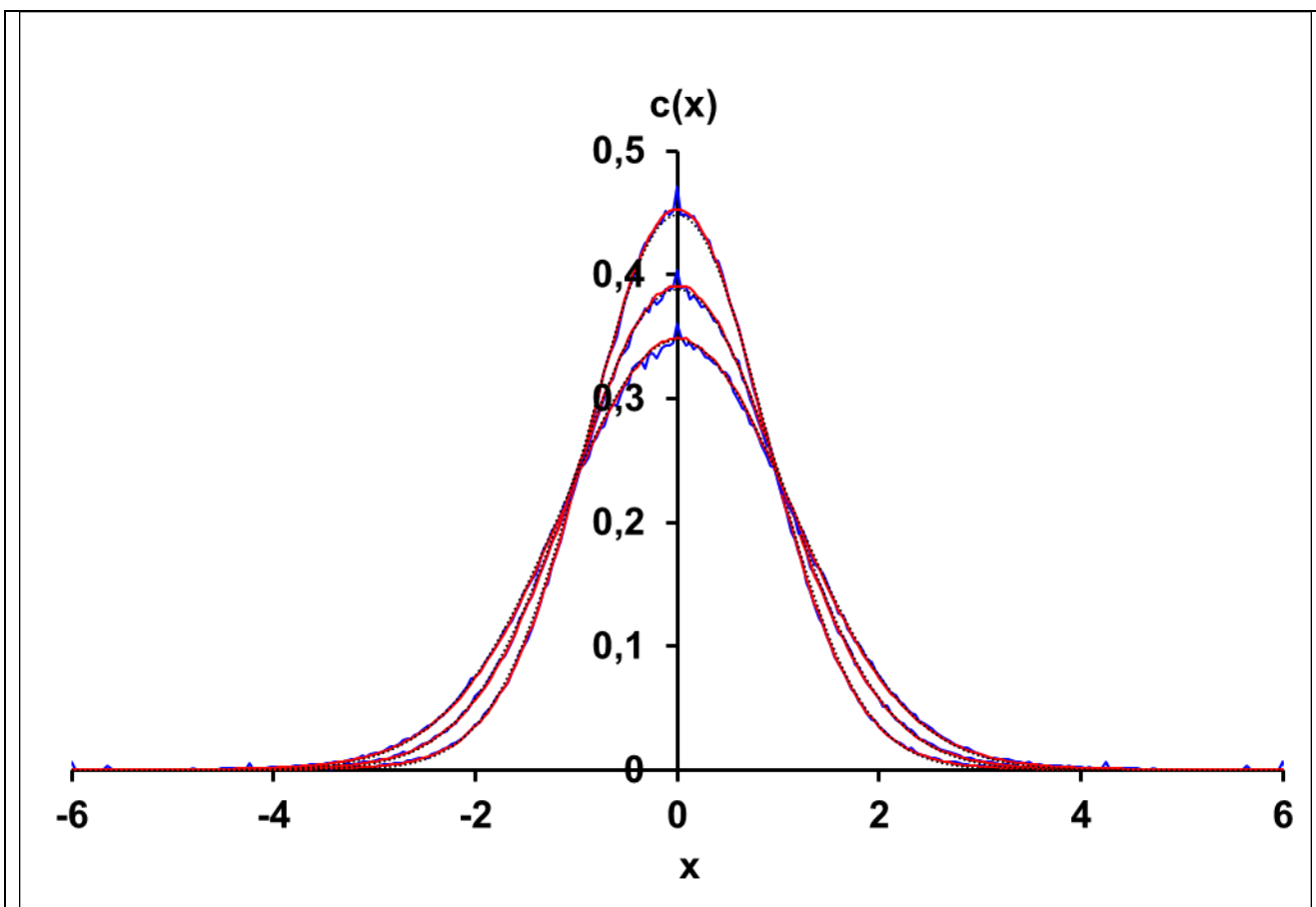


Рис. 17. Распределение концентрации диффундирующих частиц для $\lambda = 25$ (синяя кривая) и решение уравнения (красная кривая) в моменты времени $t = 0.6T$, $t = 0.8T$ и $t = T$

Более сильную пространственную аномалию можно наблюдать при значении $\lambda = 49$, где прямое моделирование дает $p \approx 1.12$. Этот процесс также можно описать уравнением (14), но уже с дробной производной по пространству порядка $\alpha = 1.90$ (рис. 18).

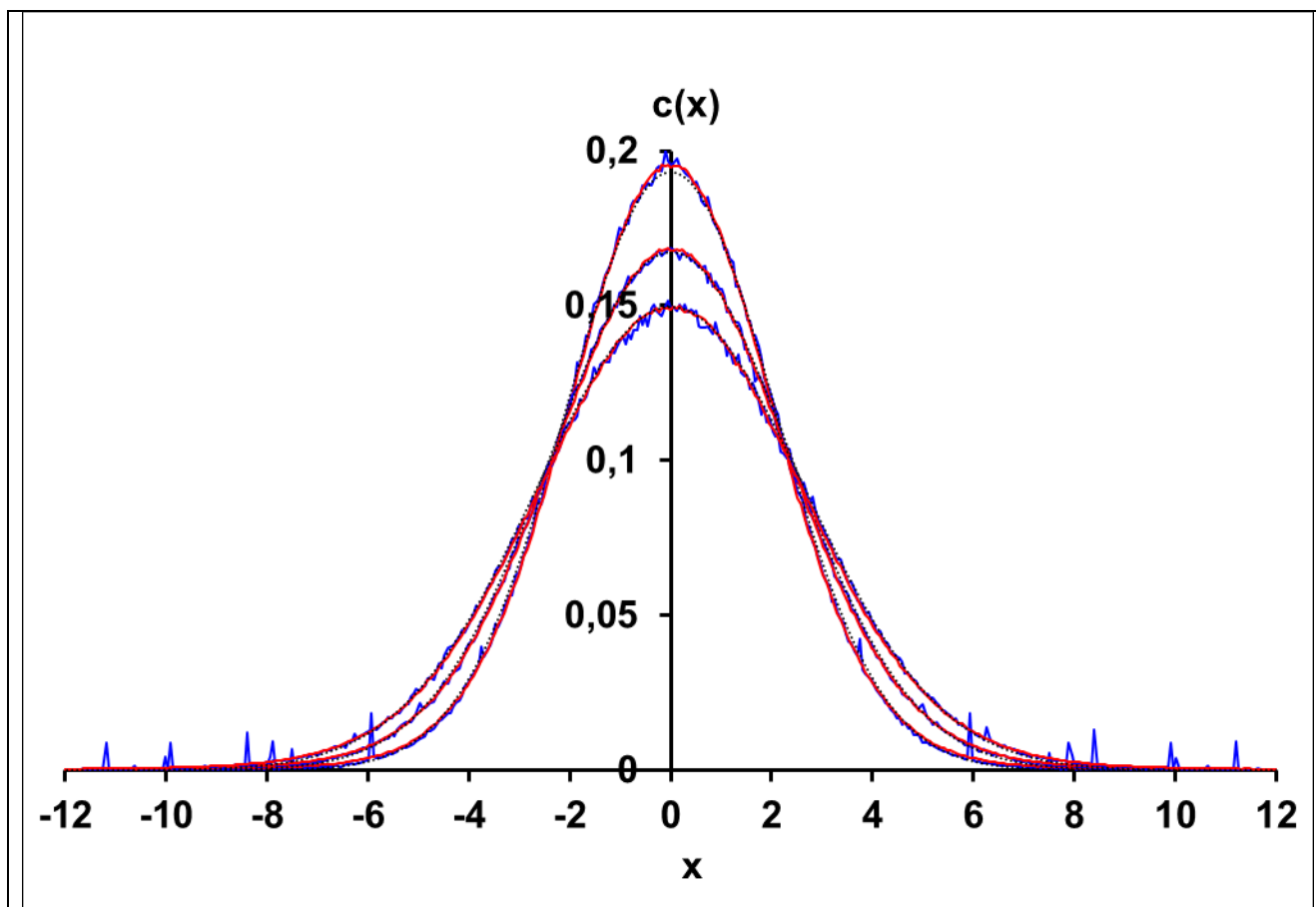


Рис. 18. Распределение концентрации диффундирующих частиц для $\lambda = 49$ (синяя кривая) и решение уравнения (красная кривая) в моменты времени $t = 0.6T$, $t = 0.8T$ и $t = T$

Таким образом, при всех $\lambda > 10$ наблюдается установление к супердиффузии с порядком $p > 1$, тем большим, чем больше λ . В результате, становится возможным влиять на порядок $p > 1$ пространственной аномалии в зависимости от параметра среды λ .

Теперь рассмотрим влияние на диффузию эффекта широкого канала. Под широким каналом будем понимать случай, когда $B > 1$. Соответственно, в этой серии задач исследуется диффузия в канале без ловушек с несколькими рядами СЭ регулярной структуры расположения ($Q = 0$, $\eta = 0$, $\mu = 1$) в зависимости от расстояния λ между СЭ, в частности при $B = 2$ и $B = 5$ (см. табл. 4).

Табл. 4. Параметры и характеристики диффузии в зависимости от расстояния λ между СЭ и числа рядов B для регулярной структуры без ловушек

<i>Параметры задачи</i>				<i>Характеристики диффузии</i>		<i>Параметры уравнения аномальной диффузии</i>			
λ	B	m	k	p	D'	α	γ	D	$2\gamma/\alpha$
9	2	6	$5 \cdot 10^5$	1.01	$6.88 \cdot 10^{-4}$	2	1	$3.54 \cdot 10^{-4}$	1.00
9	5	6	$2 \cdot 10^5$	1.00	$7.09 \cdot 10^{-4}$	2	1	$3.53 \cdot 10^{-4}$	1.00
49	2	14	$5 \cdot 10^5$	1.13	$1.39 \cdot 10^{-2}$	1.90	1	$1.20 \cdot 10^{-2}$	1.05
49	5	14	$2 \cdot 10^5$	1.13	$1.41 \cdot 10^{-2}$	1.90	1	$1.21 \cdot 10^{-2}$	1.05
64	2	16	$5 \cdot 10^5$	1.16	$1.84 \cdot 10^{-2}$	1.88	1	$1.89 \cdot 10^{-2}$	1.06
64	5	16	$2 \cdot 10^5$	1.17	$1.78 \cdot 10^{-2}$	1.88	1	$1.88 \cdot 10^{-2}$	1.06

По этим результатам в сравнении с данными табл. 3 можно сделать вывод, что дополнительные ряды СЭ в канале не влияют заметно на характер диффузии, устанавливающейся вдоль оси x .

Например, как и прежде, пространственную аномалию можно наблюдать при значении $\lambda = 49$, но при $B = 2$, которую также можно описать уравнением (14) с дробной производной по пространству порядка $\alpha = 1.90$ (рис. 19).

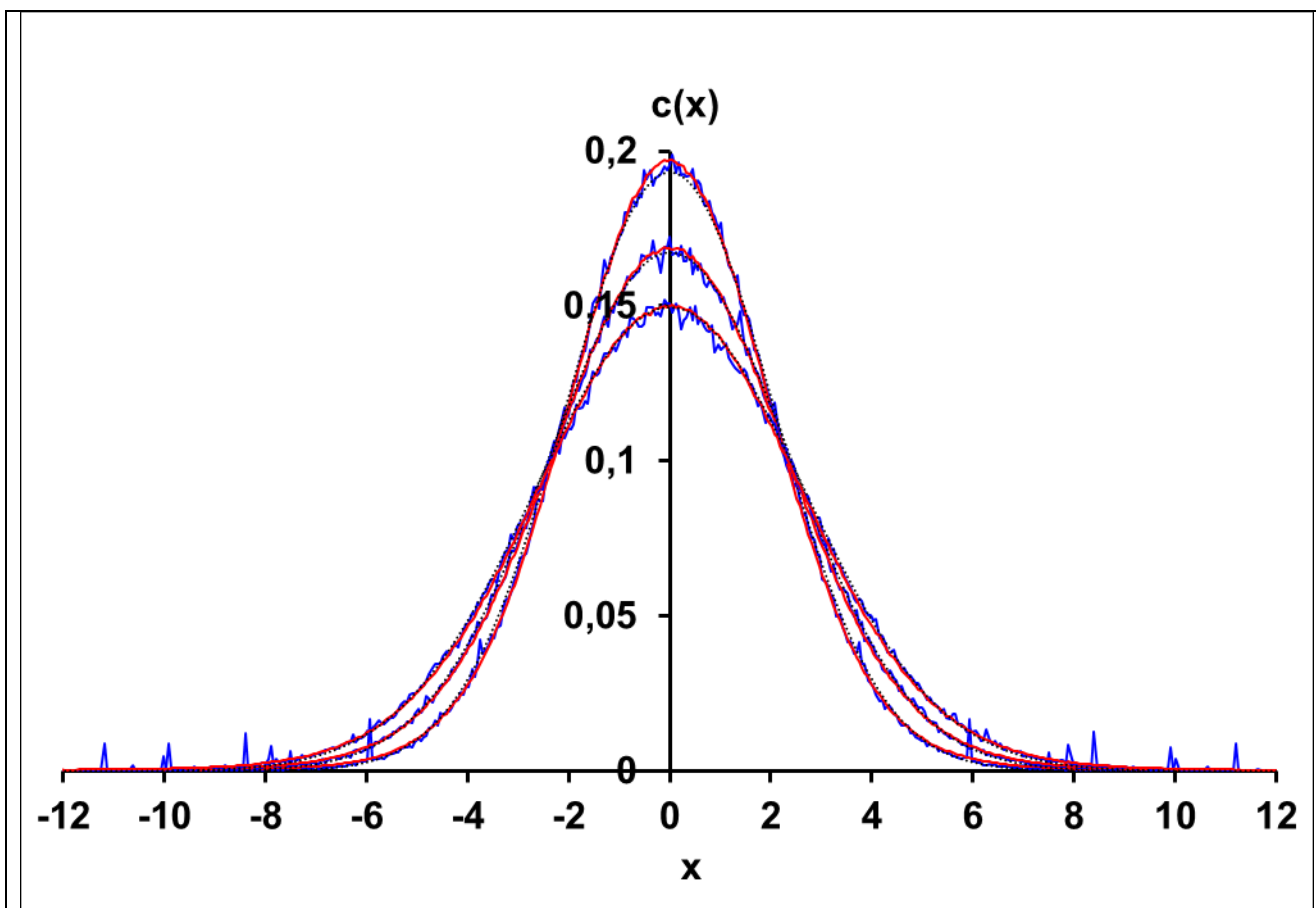


Рис. 19. Распределение концентрации диффундирующих частиц для $\lambda = 49$ и $B = 2$ (синяя кривая) и решение уравнения (красная кривая) в моменты времени $t = 0.6T$, $t = 0.8T$ и $t = T$

Таким образом, как и ранее, при $\lambda > 10$ наблюдается установление к супердиффузии с порядком $p > 1$, тем большим, чем больше λ .

В следующей серии задач исследуется диффузия в канале без ловушек с одним рядом СЭ квазирегулярной структуры расположения ($Q = 1$, $B = 1$, $\eta = 0$, $\mu = 1$) в зависимости от расстояния λ между СЭ (см. табл. 5).

Табл. 5. Параметры и характеристики диффузии в зависимости от расстояния λ между СЭ для квазирегулярной структуры без ловушек

<i>Параметры задачи</i>			<i>Характеристики диффузии</i>		<i>Параметры уравнения аномальной диффузии</i>			
λ	m	k	p	D'	α	γ	D	$2\gamma/\alpha$
9	6	$5 \cdot 10^5$	1.04	$9.64 \cdot 10^{-4}$	1.96	1	$4.96 \cdot 10^{-4}$	1.02
16	8	$5 \cdot 10^5$	1.08	$2.44 \cdot 10^{-3}$	1.94	1	$1.55 \cdot 10^{-3}$	1.03
36	12	$5 \cdot 10^5$	1.11	$9.28 \cdot 10^{-3}$	1.91	1	$7.15 \cdot 10^{-3}$	1.05
64	16	$5 \cdot 10^5$	1.16	$1.91 \cdot 10^{-2}$	1.88	1	$1.89 \cdot 10^{-2}$	1.06

По этим результатам в сравнении с данными табл. 3 можно сделать вывод, что квазирегулярный характер расположения СЭ в канале не влияет заметно на характер диффузии, устанавливающейся вдоль оси x , при достаточно больших λ . Однако примерно при $\lambda < 36$ ситуация существенно меняется, и пространственная аномалия проявляется сильнее, чем при регулярной структуре СЭ (эффект затухает при росте λ). Результат связан с тем, что при случайном смещении расположения ряда СЭ в канале даже при значениях $\lambda < 10$ в канале могут возникнуть «прострельные» области, где частицы движутся равномерно и прямолинейно. Эти области исчезают только при падении расстояния между частицами среды до $\lambda \leq 5$, где и наблюдается нормальная диффузия.

Например, при значении $\lambda = 9$, где прежде наблюдалась классическая диффузия, теперь наблюдается пространственная аномалия, которую можно описать уравнением (14) с дробной производной по пространству порядка $\alpha = 1.96$ (рис. 20).

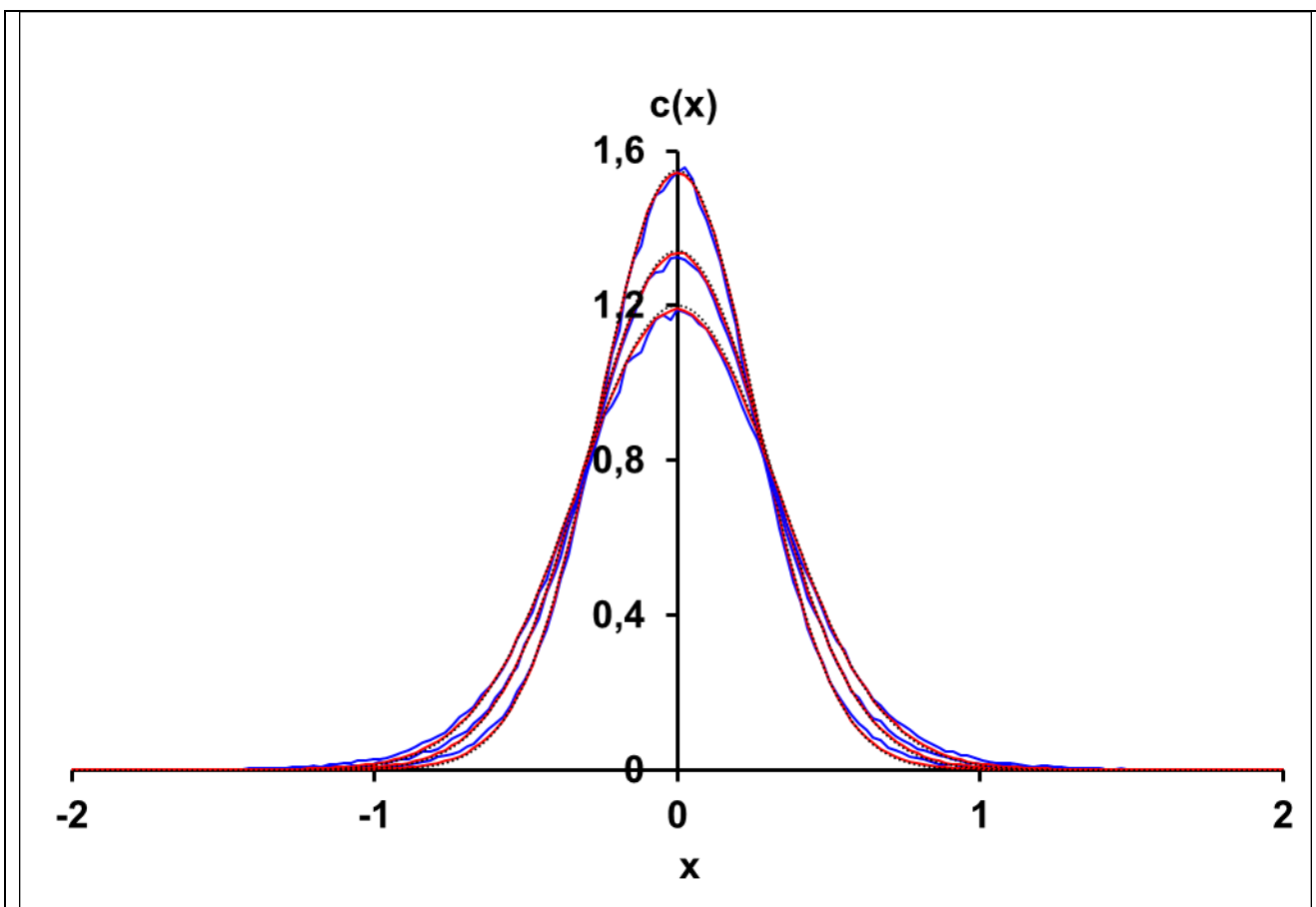


Рис. 20. Распределение концентрации диффундирующих частиц для $\lambda = 9$ (синяя кривая) и решение уравнения (красная кривая) в моменты времени $t = 0.6T$, $t = 0.8T$ и $t = T$

Таким образом, при $\lambda > 5$ наблюдается установление к супердиффузии с порядком $p > 1$, тем большим, чем больше λ .

В очередной серии задач исследуется диффузия в канале без ловушек с одним рядом СЭ квазислучайной структуры расположения ($Q = 2$, $B = 1$, $\eta = 0$, $\mu = 1$) в зависимости от расстояния λ между СЭ (см. табл. 6).

Табл. 6. Параметры и характеристики диффузии в зависимости от расстояния λ между СЭ для квазислучайной структуры без ловушек

<i>Параметры задачи</i>			<i>Характеристики диффузии</i>		<i>Параметры уравнения аномальной диффузии</i>			
λ	m	k	p	D'	α	γ	D	$2\gamma/\alpha$
9	6	$5 \cdot 10^5$	1.00	$7.66 \cdot 10^{-4}$	2	1	$3.78 \cdot 10^{-4}$	1.00
16	8	$5 \cdot 10^5$	1.00	$2.64 \cdot 10^{-3}$	2	1	$1.28 \cdot 10^{-3}$	1.00
36	12	$5 \cdot 10^5$	1.02	$1.21 \cdot 10^{-2}$	1.99	1	$6.78 \cdot 10^{-3}$	1.01
49	14	$5 \cdot 10^5$	1.04	$2.08 \cdot 10^{-2}$	1.98	1	$1.19 \cdot 10^{-2}$	1.01

По этим результатам в сравнении с данными табл. 3 можно сделать вывод, что квазислучайный характер расположения СЭ в канале по сравнению с регулярным резко снижает порядок пространственной аномалии диффузии, которая даже при достаточно больших λ остаётся близкой к нормальной. Результат связан с тем, что при случайном смещении расположения каждого СЭ даже при больших значениях λ вероятность возникновения в канале «прострельных» областей больше λd мала (а бесконечные таковые области теперь попросту невозможны).

В заключительной серии задач исследуется диффузия в канале без ловушек с одним рядом СЭ случайной структуры расположения ($Q = 3$, $B = 1$, $\eta = 0$, $\mu = 1$) в зависимости от расстояния λ между СЭ (см. табл. 7).

Табл. 7. Параметры и характеристики диффузии в зависимости от расстояния λ между СЭ для случайной структуры без ловушек

<i>Параметры задачи</i>			<i>Характеристики диффузии</i>		<i>Параметры уравнения аномальной диффузии</i>			
λ	m	k	p	D'	α	γ	D	$2\gamma/\alpha$
9	6	$5 \cdot 10^5$	0.98	$8.19 \cdot 10^{-4}$	2	1	$3.72 \cdot 10^{-4}$	1.00
16	8	$5 \cdot 10^5$	1.00	$2.63 \cdot 10^{-3}$	2	1	$1.29 \cdot 10^{-3}$	1.00
36	12	$5 \cdot 10^5$	1.02	$1.24 \cdot 10^{-2}$	1.99	1	$6.86 \cdot 10^{-3}$	1.01
49	14	$5 \cdot 10^5$	1.03	$2.15 \cdot 10^{-2}$	1.98	1	$1.19 \cdot 10^{-2}$	1.01

Имеет место случай, близкий к предыдущему. По представленным результатам в сравнении с данными табл. 3 можно сделать вывод, что случайный характер расположения СЭ в канале по сравнению с регулярным также резко снижает порядок пространственной аномалии диффузии, которая и при достаточно больших значениях λ остаётся близкой к нормальной. Как и раньше, при случайном расположении СЭ в канале в канале маловероятно возникновение «прострельных» областей больше λd . Можно отметить, что последние два типа расположения СЭ ($Q = 2, 3$) вносят в среду большой элемент хаоса, что и предопределяет исчезновение «аномальности» диффузии.

Таким образом, последние два случая не представляют значительного интереса по отношению к поиску механизмов появления пространственной аномалии.

3.4. Механизмы появления временной аномалии

В очередной серии задач исследуется диффузия в канале с экспоненциальными ловушками с одним рядом СЭ регулярной структуры расположения при небольших значениях λ ($Q = 0$, $B = 1$, $\lambda = 9$, $\mu < 1$) в зависимости от параметров ловушек η и μ (см. табл. 8).

Табл. 8. Параметры и характеристики диффузии в зависимости от параметров ловушек η и μ для регулярной структуры с экспоненциальными ловушками

Параметры задачи				Характеристики диффузии		Параметры уравнения аномальной диффузии			
η	μ	m	k	p	D'	α	γ	D	$2\gamma/\alpha$
0.5	0.001	9	$2 \cdot 10^6$	0.95	$5.18 \cdot 10^{-5}$	2	0.95	$2.41 \cdot 10^{-5}$	0.95
0.75	0.001	9	$2 \cdot 10^6$	0.94	$3.57 \cdot 10^{-5}$	2	0.95	$1.59 \cdot 10^{-5}$	0.95
1	0.001	9	$2 \cdot 10^6$	0.94	$2.78 \cdot 10^{-5}$	2	0.95	$1.23 \cdot 10^{-5}$	0.95
1	0.002	9	$2 \cdot 10^6$	0.97	$4.34 \cdot 10^{-5}$	2	0.97	$2.11 \cdot 10^{-5}$	0.97
1	0.003	7	$2 \cdot 10^6$	0.97	$6.23 \cdot 10^{-5}$	2	0.98	$2.82 \cdot 10^{-5}$	0.98
1	0.004	6	$2 \cdot 10^6$	0.98	$7.86 \cdot 10^{-5}$	2	0.99	$3.42 \cdot 10^{-5}$	0.99
1	0.005	6	$2 \cdot 10^6$	0.99	$9.24 \cdot 10^{-5}$	2	0.99	$4.19 \cdot 10^{-5}$	0.99

По этим результатам можно сделать вывод, что, несмотря на то, что хотя в течение некоторого времени (тем большего, чем меньше μ) наблюдается временной характер аномалии, процесс в итоге выходит на режим нормальной диффузии, а значит, экспоненциальные ловушки не могут служить в качестве механизма появления временной аномалии. Параметр же η на характер диффузии никак не влияет, а влияет только на её коэффициент, тем больший, чем меньше η , т.е. когда захват частицы в ловушку происходит реже.

Это приводит к тому, что следует искать более эффективный механизм появления аномальной диффузии по времени. Его демонстрирует следующая серия задач. В ней исследуется диффузия в канале со степенными ловушками с одним рядом СЭ регулярной структуры расположения при небольших значениях λ ($Q = 0$, $B = 1$, $\lambda = 9$, $\mu > 1$) в зависимости от параметров ловушек η и μ (см. табл. 9).

Табл. 9. Параметры и характеристики диффузии в зависимости от параметров ловушек η и μ для регулярной структуры со степенными ловушками

Параметры задачи				Характеристики диффузии		Параметры уравнения аномальной диффузии			
η	μ	m	k	p	D'	α	γ	D	$2\gamma/\alpha$
0.5	1.1	10	$2 \cdot 10^6$	0.63	$2.01 \cdot 10^{-4}$	2	0.71	$5.19 \cdot 10^{-5}$	0.71
0.75	1.1	10	$2 \cdot 10^6$	0.62	$1.40 \cdot 10^{-4}$	2	0.71	$3.62 \cdot 10^{-5}$	0.71
1	1.1	10	$2 \cdot 10^6$	0.62	$1.06 \cdot 10^{-4}$	2	0.71	$2.75 \cdot 10^{-5}$	0.71
1	1.2	8	$2 \cdot 10^6$	0.83	$9.42 \cdot 10^{-5}$	2	0.91	$2.48 \cdot 10^{-5}$	0.91
1	1.3	6	$2 \cdot 10^6$	0.89	$1.62 \cdot 10^{-4}$	2	0.94	$5.59 \cdot 10^{-5}$	0.94
1	1.4	4	$2 \cdot 10^6$	0.94	$2.59 \cdot 10^{-4}$	2	0.97	$9.82 \cdot 10^{-5}$	0.97
1	1.5	4	$2 \cdot 10^6$	0.97	$3.46 \cdot 10^{-4}$	2	0.98	$1.59 \cdot 10^{-4}$	0.98

По этим результатам можно сделать вывод, что процесс в итоге выходит на режим субдиффузии, которая тем сильнее, чем меньше $\mu > 1$, а значит, степенные ловушки могут быть причиной появления временной аномалии. Параметр η на порядок диффузии никак не влияет, а, как и в предыдущем случае, влияет только на её коэффициент, тем больший, чем меньше η , т.е. когда захват частицы в ловушку происходит реже.

Режим диффузии близкой к нормальной наблюдается при относительно больших значениях параметра ловушки μ ($\mu > 1.5$). В этом случае ловушечный эффект практически не заметен. Например, при $\mu = 1.5$ прямое моделирование дает $p = 0.97$ (рис. 21).

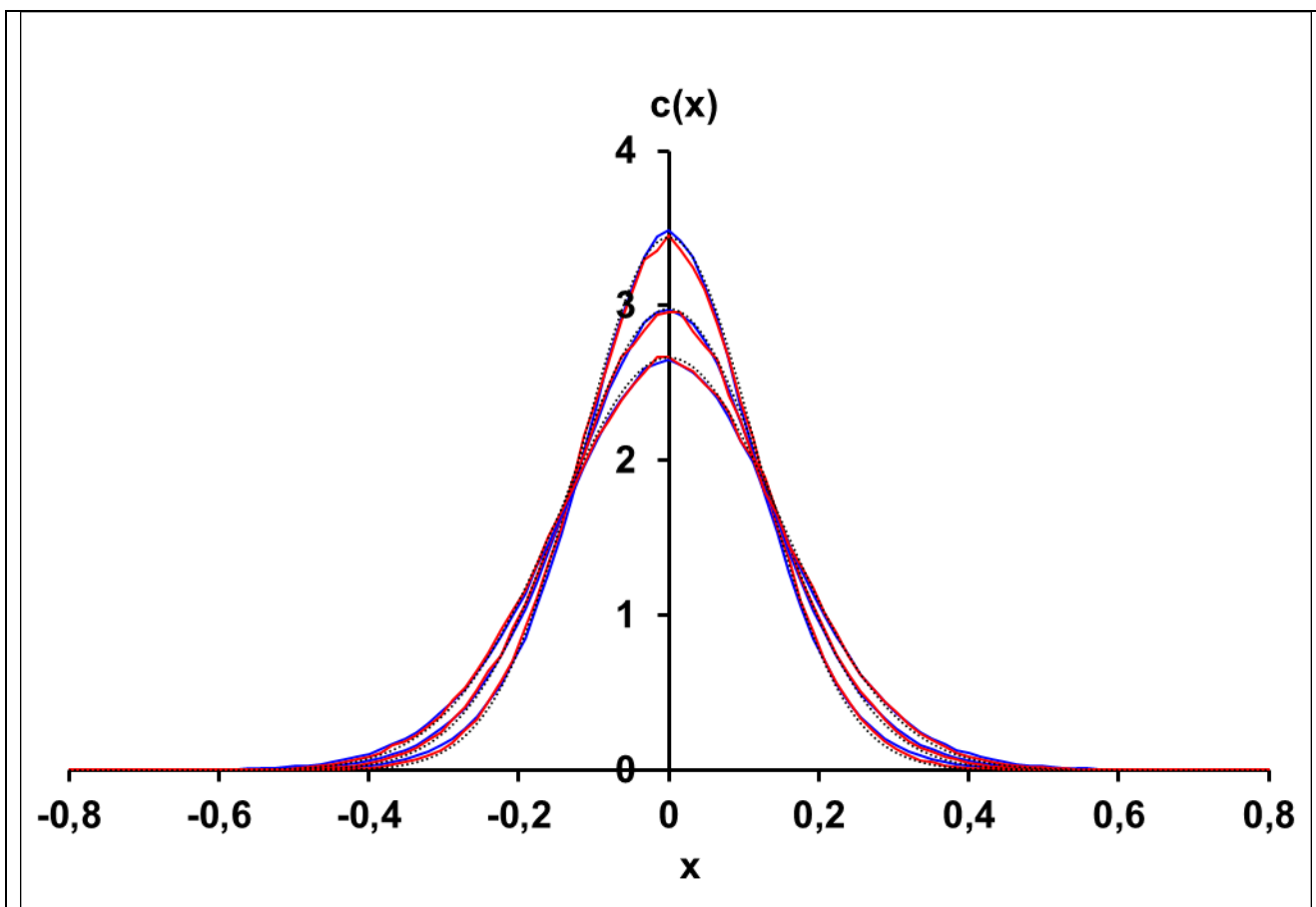


Рис. 21. Распределение концентрации диффундирующих частиц для $\mu = 1.5$ (синяя кривая) и решение уравнения (красная кривая) в моменты времени $t = 0.6T$, $t = 0.8T$ и $t = T$

В случае более сильной степенной ловушки ($\mu < 1.5$) возникающая временная аномалия приводит к субдиффузии. Например, в варианте $\mu = 1.1$ прямое моделирование дает $p \approx 0.62$. Этот процесс можно описать уравнением (14) с дробной производной по времени порядка $\gamma = 0.71$ (рис. 22).

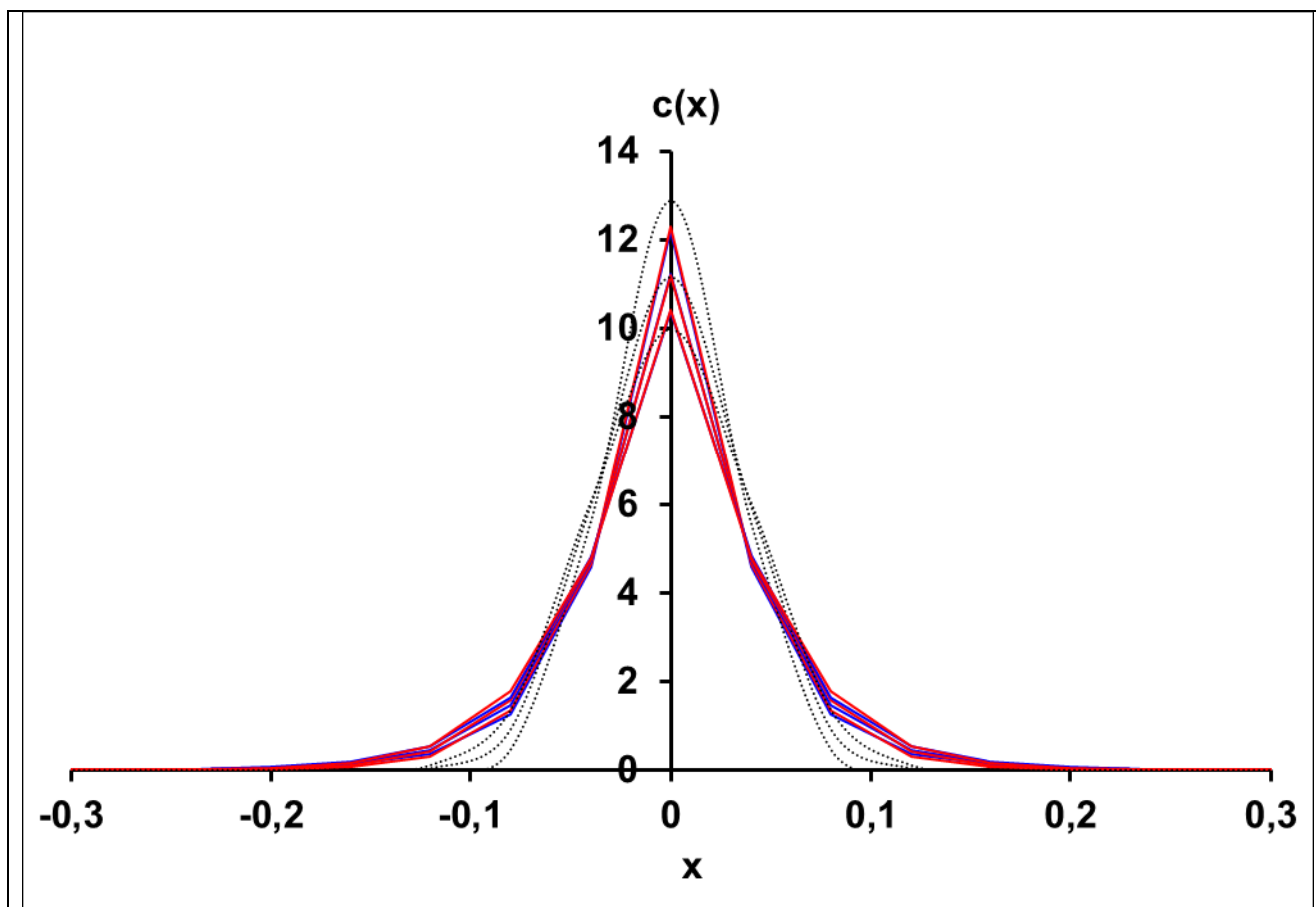


Рис. 22. Распределение концентрации диффундирующих частиц для $\mu = 1.1$ (синяя кривая) и решение уравнения (красная кривая) в моменты времени $t = 0.6T$, $t = 0.8T$ и $t = T$

Таким образом, при всех $\mu > 1$ наблюдается установление к режиму субдиффузии с порядком $p < 1$, тем меньшим, чем меньше μ . В результате, становится возможным влиять на порядок $p < 1$ временной аномалии в зависимости от параметра среды μ .

3.5. Механизмы появления комбинированной аномалии

Теперь, имея пару различных механизмов появления пространственной и временной аномалий в канале, рассмотрим их совместное действие, приводящее к возникновению комбинированной аномалии. Это демонстрирует следующая серия задач. В ней исследуется диффузия в канале со степенными ловушками с одним рядом СЭ регулярной структуры расположения ($Q = 0$, $B = 1$, $\eta = 1$, $\mu > 1$) при произвольных значениях λ и в зависимости от параметра ловушки μ (см. табл. 10).

Табл. 10. Параметры и характеристики диффузии в зависимости от параметров λ и μ для регулярной структуры со степенными ловушками

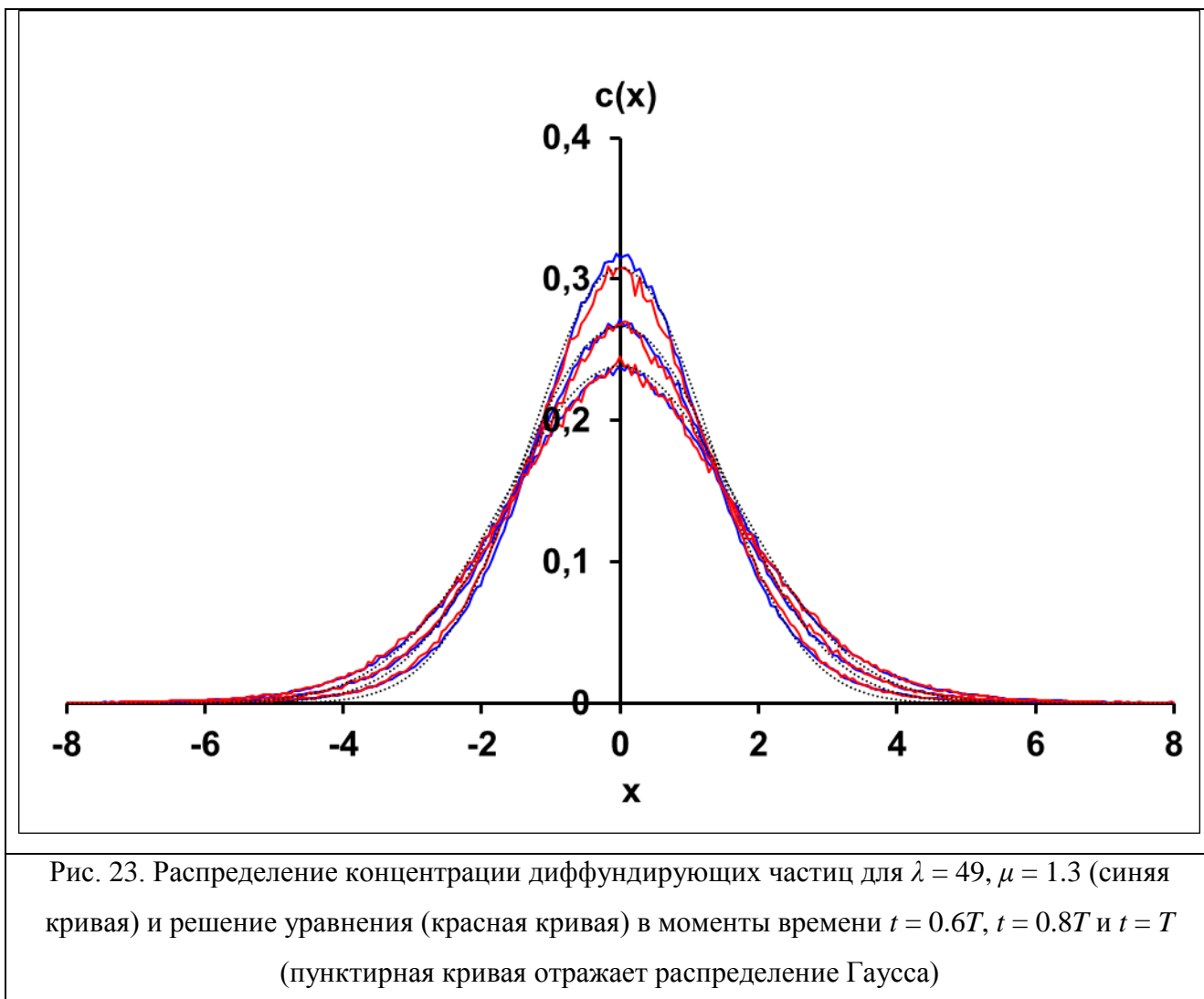
Параметры задачи				Характеристики диффузии		Параметры уравнения аномальной диффузии			
λ	μ	m	k	p	D'	α	γ	D	$2\gamma/\alpha$
36	1.1	24	10^6	0.98	$1.77 \cdot 10^{-3}$	1.92	0.77	$1.62 \cdot 10^{-3}$	0.80
36	1.2	16	10^6	1.01	$3.09 \cdot 10^{-3}$	1.92	0.93	$1.53 \cdot 10^{-3}$	0.97
36	1.3	12	10^6	1.06	$4.48 \cdot 10^{-3}$	1.92	0.95	$3.26 \cdot 10^{-3}$	0.99
49	1.1	26	10^6	0.97	$3.87 \cdot 10^{-3}$	1.90	0.77	$4.02 \cdot 10^{-3}$	0.81
49	1.2	18	10^6	1.04	$5.69 \cdot 10^{-3}$	1.90	0.93	$3.72 \cdot 10^{-3}$	0.98
49	1.3	14	10^6	1.09	$7.95 \cdot 10^{-3}$	1.90	0.95	$7.23 \cdot 10^{-3}$	1.00
64	1.2	20	10^6	1.07	$8.93 \cdot 10^{-3}$	1.88	0.93	$7.66 \cdot 10^{-3}$	0.99

Таким образом, рассматривается сочетание двух различных, напрямую не связанных между собой «генераторов аномалий» – «разреженной» среды ($\lambda > 10$) для аномалии по пространству и активной стенки-ловушки ($\mu > 1$) для аномалии по времени. По полученным результатам можно сделать вывод, что сочетание в канале этих двух механизмов в итоге после установления процесса позволяет наблюдать комбинированную пространственно-временную аномальную диффузию порядка $0 < p < 2$, временная компонента которой определяется параметром μ , а пространственная – параметром λ .

Кроме того, сравнивая результаты из табл. 10 с данными табл. 3 и табл. 9, можно видеть, что идея расщепления аномалий может быть применима и на макроуровне, т.е. процесс хорошо описывается дробно-дифференциальным уравнением (14) с дробными производными по времени и по пространству, близкими к взятым из решений соответствующих задач с одним видом аномалии.

Например, на рис. 23 можно заметить, что, несмотря на показатель степени p около единицы, реальное распределение диффундирующих частиц

далеко от Гауссовского. Однако при этом процесс хорошо описывается дробно-дифференциальным уравнением с параметрами, которые близки к числам, взятым из предыдущих экспериментов, т.е. с дробными производными по времени $\gamma \approx 0.95$ и по пространству $\alpha \approx 1.90$.



Следует отметить, что в предложенной модели взаимная зависимость параметров α и λ однозначна – начиная с $\lambda = 10$, $\alpha = 2$ большим λ соответствует меньшее значение α вплоть до предельных $\lambda \rightarrow \infty$, $\alpha \rightarrow 1$. Также верно и то, что взаимная зависимость параметров γ и μ однозначна – начиная с $\gamma = 1$, $\mu = \infty$ меньшим μ соответствует меньшее значение γ вплоть до предельных $\gamma \rightarrow 0$, $\mu \rightarrow 1$. Таким образом, оба подхода (макроскопический и микроскопический) при решении задач аномальной диффузии являются эквивалентными – одному конкретному набору макроскопических параметров (α, γ) дробно-

дифференциального уравнения (14) соответствует единственный набор микроскопических (λ , μ), и наоборот. Другие же независимые параметры модели либо влияют исключительно на коэффициент диффузии D (например, V_0 , η), либо вообще существенно на общие выводы по результатам моделирования не влияют. Это позволяет говорить о наличии целого класса родственных моделей одномерной аномальной диффузии на микроуровне с различными расположением частиц среды и свойствами стенок.

3.6. Моделирование аномальной диффузии вдоль границ зёрен

В заключение темы вернёмся к началу главы и отметим, что зернограничная диффузия – явление переноса, имеющее большое фундаментальное и практическое значение. Факт, что границы зёрен в металлах создают каналы ускоренной диффузии, был надёжно зарегистрирован уже к 1950 г. Профили зависимости концентрации, измеренные на поликристаллах, ясно демонстрировали глубоко проникающие «хвосты», которые были правильно объяснены влиянием диффузии вдоль границ зёрен [80].

В результате, опираясь на вышеизложенные факты, рассмотрим родственный механизм появления аномальной диффузии по пространству в следующей серии задач. В ней исследуется диффузия в широком канале без ловушек с несколькими рядами СЭ регулярной структуры расположения при небольших значениях λ ($Q = 0$, $\lambda = 9$, $\eta = 0$, $\mu = 1$). Канал вмещает несколько рядов СЭ (B), но при этом в нём сделаны вырезы, т.е. несколько рядов ($A < B$) убраны из центра канала (см. табл. 11).

Табл. 11. Параметры и характеристики диффузии в зависимости от
числа рядов B и числа вырезов A для регулярной структуры без ловушек

<i>Параметры задачи</i>				<i>Характеристики диффузии</i>		<i>Параметры уравнения аномальной диффузии</i>			
B	A	m	k	p	D'	α	γ	D	$2\gamma/\alpha$
3	1	6	$5 \cdot 10^5$	1.05	$1.28 \cdot 10^{-3}$	1.91	1	$7.68 \cdot 10^{-4}$	1.05
4	2	6	$5 \cdot 10^5$	1.12	$1.61 \cdot 10^{-3}$	1.85	1	$1.25 \cdot 10^{-3}$	1.08
5	1	6	$2.5 \cdot 10^5$	1.07	$9.21 \cdot 10^{-4}$	1.93	1	$5.93 \cdot 10^{-4}$	1.04
5	3	6	$5 \cdot 10^5$	1.13	$2.13 \cdot 10^{-3}$	1.84	1	$1.68 \cdot 10^{-3}$	1.09
6	2	6	$2.5 \cdot 10^5$	1.10	$1.31 \cdot 10^{-3}$	1.87	1	$9.31 \cdot 10^{-4}$	1.07

По этим результатам можно сделать вывод, что при сохранении ширины канала B увеличение числа убираемых рядов A усиливает пространственную аномалию диффузионного процесса. То же происходит и при увеличении ширины канала B в случае сохранения реального числа рядов СЭ ($B - A$). В случае же сохранения числа вырезов A с увеличением ширины канала B пространственная аномалия уменьшается.

Следует отметить, что отличительной чертой данного варианта является относительно меньшее время, требуемое для установления диффузионного процесса.

В простейшем примере ($B = 3, A = 1$) отсутствие центрального ряда СЭ приводит к супердиффузии, и прямое моделирование дает $p \approx 1.05$. Этот процесс можно описать уравнением (14) с дробной производной по пространству порядка $\alpha = 1.91$ (рис. 24).

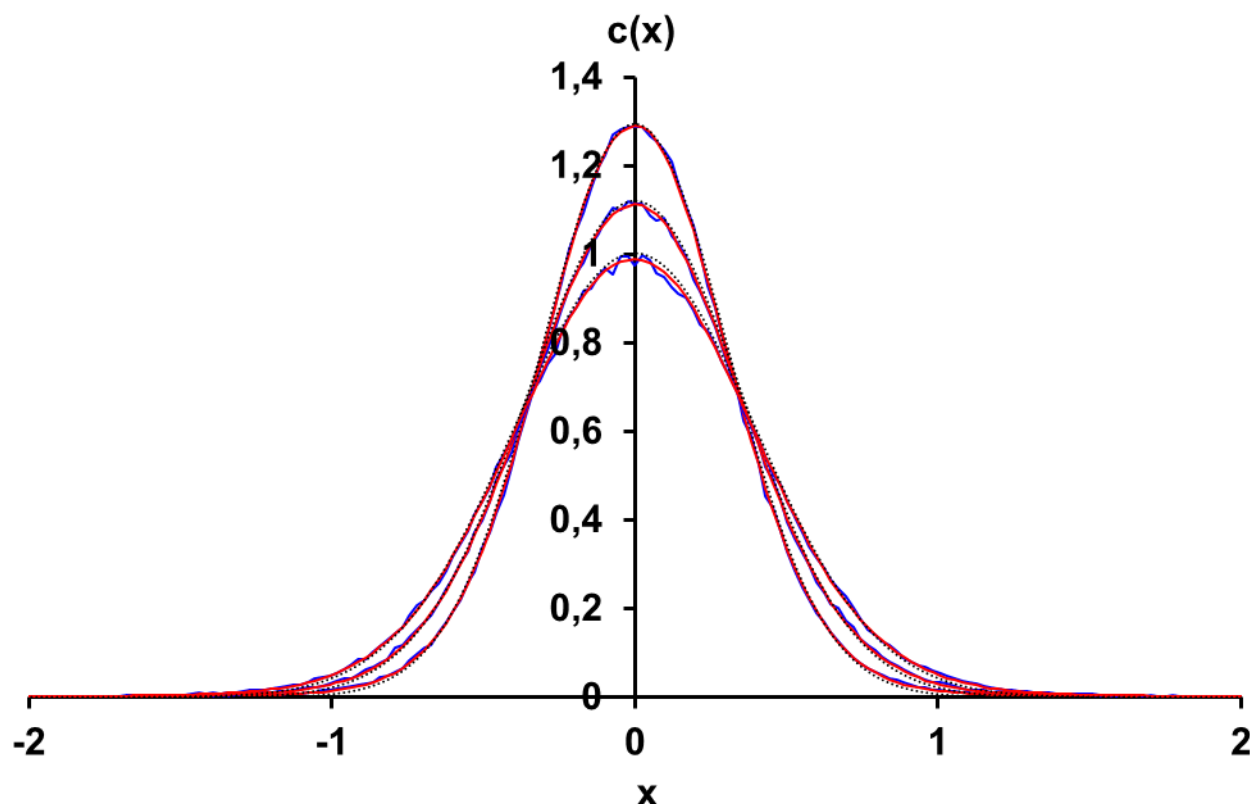


Рис. 24. Распределение концентрации диффундирующих частиц для $B = 3$, $A = 1$ (синяя кривая) и решение уравнения (красная кривая) в моменты времени $t = 0.6T$, $t = 0.8T$ и $t = T$

Более сильную пространственную аномалию можно наблюдать, например, при $B = 5$, $A = 3$, где прямое моделирование дает $p \approx 1.13$. Этот процесс также можно описать уравнением (14), но уже с дробной производной по пространству порядка $\alpha = 1.84$ (рис. 25).

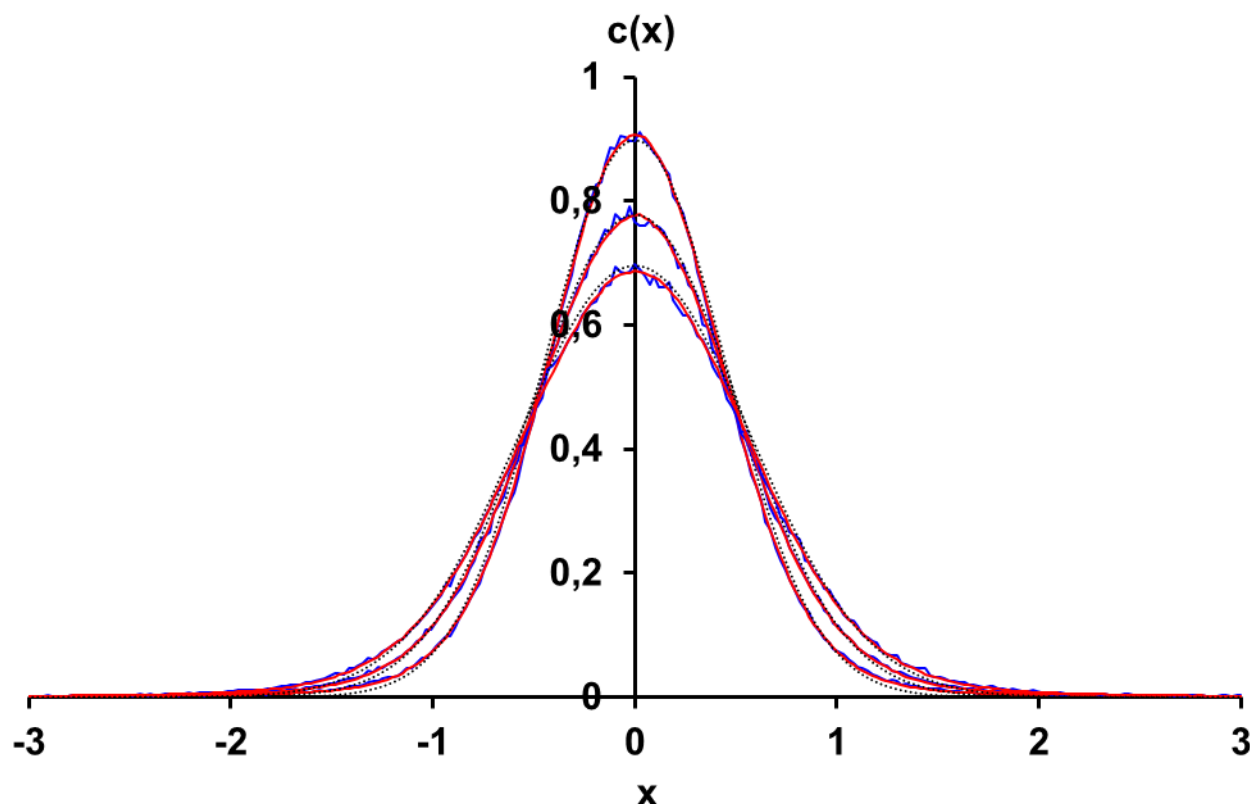


Рис. 25. Распределение концентрации диффундирующих частиц для $B = 5$, $A = 3$ (синяя кривая) и решение уравнения (красная кривая) в моменты времени $t = 0.6T$, $t = 0.8T$ и $t = T$ (пунктирная кривая отражает распределение Гаусса)

На последнем примере можно отдельно отметить наличие «тяжёлых» степенных хвостов, характерных именно для супердиффузии, для чего сравним полученные картины распределений (рис. 25) в другом масштабе (рис. 26).

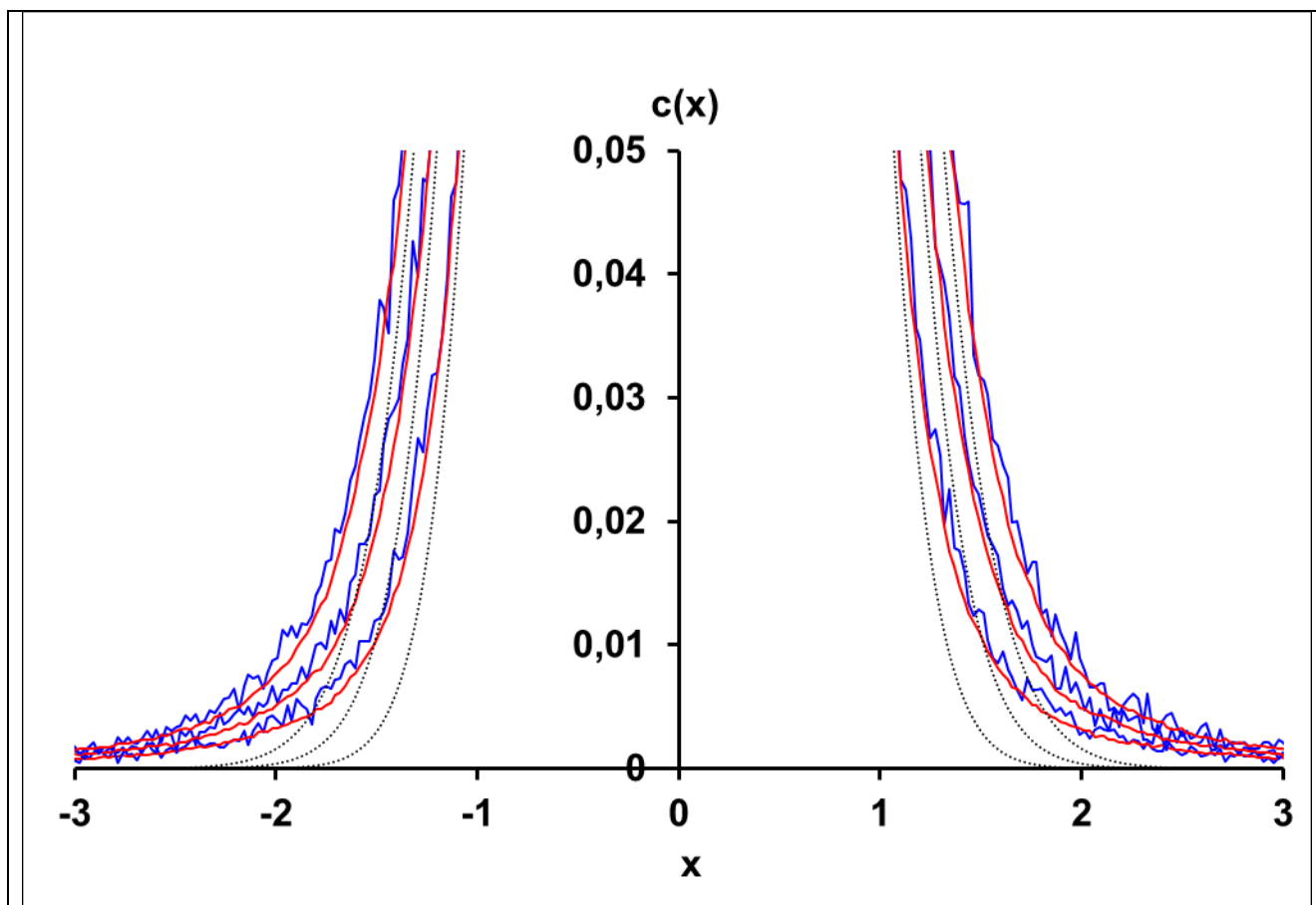


Рис. 26. Распределение концентрации диффундирующих частиц для $B = 5$, $A = 3$ (синяя кривая) и решение уравнения (красная кривая) в моменты времени $t = 0.6T$, $t = 0.8T$ и $t = T$ (пунктирная кривая отражает распределение Гаусса)

Причина появления супердиффузии при наличии вырезов – искусственное создание путём местного повышения значения параметра λ в несколько раз упомянутых ранее «прострельных» областей, при движении частицы в которых их взаимодействие со структурными элементами среды отсутствует. Как уже отмечалось, мотив эксперимента – тот факт, что при миграции атомов в твёрдом теле вдоль границ зёрен действительно наблюдались супердиффузионные явления.

Таким образом, при наличии в канале с обычной диффузией вырезов наблюдается установление к режиму супердиффузии. В результате, становится возможным влиять на порядок $p > 1$ пространственной аномалии в зависимости от параметров среды B и A .

3.7. Описание программного комплекса

В заключение изложения дадим краткое описание комплекса программ, разработанного для моделирования описанных выше процессов аномальной диффузии. Программы написаны на языке C++ в системе программирования «Microsoft Visual Studio 6.0» как Windows-приложения.

С целью проверки конечно-разностного подхода к решению дробно-дифференциальных уравнений и соответствующих ему алгоритмических схем и их основных свойств была разработана программа «FDSolver».

Программа «FDSolver» реализует конечно-разностные методы численного решения следующего обобщённого дифференциального уравнения с дробными производными по времени и пространству в случае одной пространственной координаты:

$$\frac{\partial^\gamma c(x,t)}{\partial t^\gamma} = C_+ D_+(x) \frac{\partial^\alpha c(x,t)}{\partial_+ x^\alpha} + C_- D_-(x) \frac{\partial^\alpha c(x,t)}{\partial_- x^\alpha} + q(x,t) \quad (53)$$

с условиями: $D_+(x) \geq 0$, $D_-(x) \geq 0$, $c(x,0) = F(x)$, $c(L,t) = F_L(x)$, $c(R,t) = F_R(x)$.

Её основное назначение – для заданных параметров задачи (α и γ , L и R , функций $D_+(x)$, $D_-(x)$ и $q(x,t)$, граничных и начального условий), параметров метода (C_+ , C_- , явный/неявный, метод решения СЛАУ) и параметров сетки (разбиения по x и по t и значение T) найти численное решение уравнения (53) на отрезке $L \leq x \leq R$ для промежутка времени $0 \leq t \leq T$ с заданным порядком точности. В случае решения задачи неявным методом, возможен выбор способа решения на каждом временном шаге СЛАУ – либо методом Гаусса, либо методом бисопряжённых градиентов. Порядок точности больше первого достигается алгоритмом последовательных решений задачи с возрастающими в соответствии с введённым коэффициентом разбиениями по пространству и по времени с дальнейшей цепочкой уточнений решения методом Рунге-Ромберга.

Кроме того, программа позволяет для полученного численного решения уравнения (53) осуществить его графическую визуализацию, построить графики его погрешностей, а также обеспечить по набору из нескольких

решений с одинаковыми параметрами задачи построение дополнительных графиков, оценивающих порядок аппроксимации и эффективность решений.

Для проверки правильности построения и реализации рассмотренных методов решения были использованы следующие тестовые примеры [75], содержащие точные решения задачи, наборы граничных и краевых условий и функций $D_+(x)$, $D_-(x)$ и $q(x,t)$ (см. таблицы 12 и 13, $\beta = C_+ - C_-$).

Табл. 12. Начальные и граничные условия, функции $D_+(x)$, $D_-(x)$
для подобранных точных решений задачи (53)

	$F(x)$	$F_L(t)$	$F_R(t)$	$D_+(x)$	$D_-(x)$
I	1	e^{Tt}	e^{Tt}	$\frac{\Gamma(3-\alpha)}{\Gamma(3)}x^\alpha$	$\frac{\Gamma(3-\alpha)}{\Gamma(3)}(1-x)^\alpha$
II	x^2	0	e^{Tt}	$\frac{\Gamma(3-\alpha)}{\Gamma(3)}x^\alpha$	$\frac{\Gamma(3-\alpha)}{\Gamma(3)}(1-x)^\alpha$
III	$(1-x)^2$	e^{Tt}	0	$\frac{\Gamma(3-\alpha)}{\Gamma(3)}x^\alpha$	$\frac{\Gamma(3-\alpha)}{\Gamma(3)}(1-x)^\alpha$
IV	$(x-x^2)$	0	0	$\frac{\Gamma(3-\alpha)}{\Gamma(3)}x^\alpha$	$\frac{\Gamma(3-\alpha)}{\Gamma(3)}(1-x)^\alpha$
V	0	0	t^2	$\frac{\Gamma(3-\alpha)}{\Gamma(3)}x^\alpha$	$\frac{\Gamma(3-\alpha)}{\Gamma(3)}(1-x)^\alpha$
VI	0	0	t^2	$\frac{\Gamma(3-\alpha)}{\Gamma(3)}x^\alpha$	$\frac{\Gamma(3-\alpha)}{\Gamma(3)}(1-x)^\alpha$

Табл. 13. Функция $q(x, t)$ и подобранные точные решения для задачи (53)

	$c(x, t)$	$q(x, t)$
I	e^{Tt}	$Te^{Tt} - \frac{(2-\alpha)(1-\alpha)}{2} e^{Tt}$
II	$e^{Tt} x^2$	$(T-1)x^2 e^{Tt} + \frac{(1-\beta)(\alpha + 2\alpha x - \alpha^2)}{4} e^{Tt}$
III	$e^{Tt} (1-x)^2$	$(T-1)(1-x)^2 e^{Tt} + \frac{(1+\beta)(3\alpha - 2\alpha x - \alpha^2)}{4} e^{Tt}$
IV	$e^{Tt} (x - x^2)$	$(T-1)(x - x^2) e^{Tt} + \frac{\alpha(2\beta x - \beta + 1)}{4} e^{Tt}$
V	$t^2 x^2$	$\frac{\Gamma(3)}{\Gamma(3-\gamma)} t^{2-\gamma} \cdot x^2 - t^2 x^2 + \frac{(1-\beta)(2\alpha x + \alpha - \alpha^2)}{4}$
VI	$t^2 x$	$\frac{\Gamma(3)}{\Gamma(3-\gamma)} t^{2-\gamma} \cdot x - \frac{t^2 x^2}{2 \cdot \Gamma(2-\alpha) \cdot x^{\alpha-1}}$

Точные решения данных тестовых примеров могут быть проверены прямой подстановкой функции в дробно-дифференциальное уравнение (53) и использованием формулы дробного дифференцирования:

$$\frac{\partial^\alpha}{\partial x^\alpha} (x-L)^p = \frac{\Gamma(p+1)}{\Gamma(p+1-\alpha)} (x-L)^{p-\alpha} \quad (54)$$

С целью моделирования случайного блуждания частицы по сетке и для решения соответствующих дифференциальных уравнений с дробными производными была разработана программа «RandomWalker».

Во-первых, программа «RandomWalker» реализует явный конечно-разностный метод численного решения дробно-дифференциальных уравнений (14) и (19) с учётом преобразования (41). Во-вторых, программа «RandomWalker» позволяет смоделировать случайное блуждание частицы по сетке в соответствии с формулами (37) и на его основе реализует метод

случайного блуждания для численного решения дробно-дифференциальных уравнений (14) и (19). Таким образом, её главное назначение – для заданных параметров задачи (α и γ , L и R , D и V , C_+ , C_-) выбранным методом (конечно-разностным или случайного блуждания) и параметров сетки (разбиения по x и по t и значение T) найти численное решение уравнения аномальной диффузии на отрезке $L \leq x \leq R$ для промежутка времени $0 \leq t \leq T$.

Кроме того, программа «RandomWalker» позволяет сравнить полученные численные решения между собой и с функцией Гаусса, осуществив их графическую визуализацию, построить графики вероятностей прыжков и ловушек, суммы ряда дальних прыжков. Добавлена и возможность анимированного изображения блуждания отдельной частицы по сетке.

С целью моделирования аномальной диффузии на микроуровне и для подбора соответствующих процессу дифференциальных уравнений с дробными производными была разработана программа «ParticleDynamics».

Во-первых, программа «ParticleDynamics» позволяет для заданных числа симуляций и значений всех параметров частицы, канала и стенки рассчитать пространственно-временную эволюцию частицы либо для бильярдного газа в полигональном канале, либо в среде с неоднородной структурой. При этом реализована возможность достичь необходимого числа симуляций в несколько запусков программы.

Во-вторых, программа позволяет для полученного на микроуровне распределения частиц осуществить подбор параметров α , γ и D для уравнения (14) путём его многократного решения методом случайного блуждания. Пара параметров α , γ может быть найдена либо методом Нелдера-Мида, либо последовательным применением к ним метода золотого сечения.

Кроме того, программа «ParticleDynamics» позволяет для полученных численных решений уравнения (14) и результатов микромасштабного моделирования диффузии в канале осуществить их графическую визуализацию, построить графики погрешностей, рассчитать и показать зависимости характеристик диффузии p , D и p' от времени. Отдельно в программу добавлена

возможность анимированного изображения как движения отдельной частицы в канале, так и диффузионного процесса в канале в целом.

Все значимые параметры и результаты сохраняются в текстовых файлах.

Также следует отметить высокий потенциал, которым обладают все реализованные алгоритмы по отношению к возможностям распараллеливания соответствующих вычислений. Помимо того, при необходимости функционал программного комплекса может быть достаточно просто расширен, например, для использования различных потенциалов взаимодействия и т.д.

Выводы к главе 3

В третьей главе были исследованы процессы диффузии в средах с неоднородной структурой, по результатам чего можно сделать следующие выводы:

1. В исследуемой среде с неоднородной структурой реализуются механизмы пространственной и временной аномалии, на которые могут влиять соответствующие независимые микромасштабные параметры среды.

2. Результаты прямого дискретно-элементного (микроскопического) моделирования диффузии в средах с неоднородной структурой свидетельствуют о том, что рассматриваемые процессы проявляют аномальный характер, зависящий от заданных микромасштабных параметров среды.

3. Получаемые распределения концентрации частиц могут быть достаточно точно описаны на макроуровне с использованием уравнения аномальной диффузии (14).

4. Для различных конфигураций этих сред определены параметры соответствующих дробно-дифференциальных уравнений, в результате чего разделение вкладов прыжкового и ловушечного механизмов в итоговый характер диффузии проведено как на микроуровне, так и на макроуровне, что позволяет априорно влиять на характер возникающей в среде комбинированной аномалии.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе выполнения диссертационной работы были получены следующие основные результаты:

1. Разработаны методы математического моделирования процессов аномальной диффузии в сложно структурированных средах. Реализованы два подхода к описанию аномальной диффузии – макроскопический, основанный на использовании дробно-дифференциальных уравнений, и микроскопический, предполагающий прямое моделирование динамики частиц и столкновительных процессов в системе. Предложен алгоритм идентификации параметров дробно-дифференциального уравнения по данным, поступающим с микроскопического уровня, что позволяет связать микроскопический и макроскопический подходы.

2. Построено семейство конечно-разностных схем повышенного порядка точности для решения дробно-дифференциальных уравнений. На основе анализа эффективности методов повышенного порядка точности с позиций критерия «точность – вычислительные затраты» установлено, что предложенное семейство алгоритмов превосходит конечно-разностные схемы первого порядка.

3. Предложена модификация метода случайного блуждания применительно к решению дифференциальных уравнений, содержащих дробные производные по пространственной и временной координатам. Показано, что при наличии временной аномалии с увеличением числа рассчитываемых слоёв метод случайного блуждания при той же точности начинает превосходить по скорости конечно-разностные методы.

4. Создан комплекс программ для моделирования процессов аномальной диффузии на микро- и макроуровнях. Осуществлена программная реализация дискретно-элементных моделей с различным характером межчастичного взаимодействия и алгоритмов численного решения дробно-дифференциальных уравнений с использованием конечно-разностных схем повышенного порядка точности и метода случайного блуждания. Разработанное программное обеспечение позволяет моделировать

пространственно-временную эволюцию частиц в сложно структурированных средах и осуществлять подбор параметров соответствующего дробно-дифференциального уравнения по результатам микромасштабного моделирования. Программный комплекс оснащён средствами распараллеливания вычислений и визуализации результатов расчётов.

5. На основе разработанных средств математического моделирования проведено исследование аномальной диффузии частиц в полигональных каналах и неоднородных средах. Выявлены основные закономерности влияния характерных параметров среды на возникновение режимов супердиффузии и субдиффузии. Проведено разделение вкладов баллистического (прыжкового) и ловушечного механизмов в итоговый характер диффузии, определены условия проявления пространственной, временной и комбинированной аномалий. Показана эквивалентность микроскопического и макроскопического подходов к моделированию аномальной диффузии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Самко С.Г., Килбас А.А., Маричев О.И.** *Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения.* – Минск: «Наука и техника», 1987. – 688 с.
2. **Нигматуллин Р.Р.** *Дробный интеграл и его физическая интерпретация.* // Теоретическая и математическая физика, т. 90, № 3, 1992 г., стр. 354–368.
3. **Головизнин В.М., Киселев В.П., Короткин И.А., Юрков Ю.П.** *Некоторые особенности вычислительных алгоритмов для уравнений дробной диффузии:* Препринт IBRAE-2002-01. – М.: ИБРАЭ РАН, 2002.
4. **Нахушев А.М.** *Дробное исчисление и его применение.* – М.: «ФИЗМАТЛИТ», 2003. – 272 с.
5. **Псху А.В.** *Уравнения в частных производных дробного порядка.* – М.: Наука, 2005. – 199 с.
6. **Нахушева В.А.** *Дифференциальные уравнения математических моделей нелокальных процессов.* – М.: Наука, 2006. – 173 с.
7. **Сербина Л.И.** *Нелокальные математические модели переноса в водоносных системах.* – М.: Наука, 2007. – 167 с.
8. **Олемской А.И., Харченко Д.О.** *Самоорганизация самоподобных стохастических систем.* – М., Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, 2007. – 296 с.
9. **Васильев В.В., Симак Л.А.** *Дробное исчисление и аппроксимационные методы в моделировании динамических систем.* Научное издание. – Киев: НАН Украины, 2008. – 256 с.
10. **Учайкин В.В.** *Метод дробных производных.* – Ульяновск: «Артишок», 2008. – 512 с.
11. **Бабенко Ю.И.** *Метод дробного дифференцирования в прикладных задачах теории тепломассообмена.* – СПб.: НПО «Профессионал», 2009. – 584 с.

12. **Тарасов В.Е.** *Модели теоретической физики с интегрированием дробного порядка.* – М., Ижевск: РХД, 2010. – 568 с.
13. **Miller K.S., Ross B.** *An introduction to the fractional calculus and fractional differential equations,* Wiley, New York (1993).
14. **Samorodnitsky G., Taqqu M.S.** *Stable non-Gaussian random processes,* Chapman and Hall, New York (1994).
15. **Podlubny I.** *Fractional differentiatl equations,* Academic Press, San Diego (1999).
16. **Kilbas A.A., Srivastava H.M., Trujillo J.J.** *Theory and applications of fractional differential equations,* Amsterdam, The Netherlands (2006).
17. **Короткин И.А.** *Некоторые математические модели переноса радионуклидов в сильно неоднородных геологических формациях.* // Диссертация на соискание уч. ст. канд. ф.-м. н. – М., 2006. – 188 с.
18. **Meerschaert M.M., Benson D.A., Baeumer B.** *Multidimensional advection and fractional dispersion.* // *Physical Review E* 59, № 5 (1999), pp. 5025–5028.
19. **Benson D.A., Wheatcraft S. W., Meerschaert M.M.** *Application of a fractional advection-dispersion equation.* // *Water Resources Research*, vol. 36, № 6 (2000), pp. 1403–1412.
20. **Benson D.A., Wheatcraft S. W., Meerschaert M.M.** *The fractional-order governing equation of Levy motion.* // *Water Resources Research*, vol. 36, № 6 (2000), pp. 1413–1423.
21. **Benson D.A., Schumer R., Meerschaert M.M., Wheatcraft S.W.** *Fractional dispersion, Levy motion, and the MADE tracer tests.* // *Transport in Porous Media* 42 (2001), pp. 211–240.
22. **Schumer R., Benson D.A., Meerschaert M.M., Wheatcraft S.W.** *Eulerian derivation of the fractional advection-dispersion equation.* // *Journal of the Contaminant Hydrology* 48 (2001), pp. 69–88.
23. **Meerschaert M.M., Benson D.A., Baeumer B.** *Operator Levy motion and multiscaling anomalous diffusion.* // *Physical Review E* 63, 021112 (2001).

24. **Herrick M.G., Benson D.A., Meerschaert M.M., McCall K.R.** *Hydraulic conductivity, velocity, and the order of the fractional dispersion derivative in a highly heterogeneous system.* // Water Resources Research, vol. 38, № 11 (2002).
25. **Meerschaert M.M., Tadjeran C.** *Finite difference approximations for fractional advection-dispersion flow equations.* // Journal of Computational and Applied Mathematics 172 (2004), pp. 65–77.
26. **Yong Zhang, Benson D.A., Meerschaert M.M., LaBolle E. M., Scheffler H.-P.** *Random walk approximation of fractional-order multiscaling anomalous diffusion.* // Physical Review E 74, 026706 (2006).
27. **Meerschaert M.M., Tadjeran C.** *Finite difference approximations for two-sided space-fractional partial differential equations.* // Application of Numerical Mathematics 56 (1) (2006), pp. 80–90.
28. **Meerschaert M.M., Scheffler P., Tadjeran C.** *Finite difference methods for two-dimensional fractional dispersion equation.* // Journal of Computational Physics 211 (2006), pp. 249–261.
29. **Meerschaert M.M., Tadjeran C.** *A second-order accurate numerical method for the two-dimensional fractional diffusion equation.* // Journal of Computational Physics 220 (2007), pp. 813–823.
30. **Meerschaert M.M., Yong Zhang, Baeumer B.** *Tempered anomalous diffusion in heterogeneous systems.* // Geographical Research letters, vol. 35, L17403 (2008).
31. **Mainardi F.** *Fractals and fractional calculus continuum mechanics,* Springer Verlag (1997), pp. 291–348.
32. **Gorenflo R., Mainardi F.** *Random walk models for space-fractional diffusion processes.* // Fractional Calculus & Applied Analysis, vol. 1, № 2 (1998), pp. 167–191.
33. **Gorenflo R., Mainardi F.** *Essentials of fractional calculus.* // Preprint to MaPhySto Center (2000).
34. **Gorenflo R., Mainardi F., Raberto M., Scalas E.** *Fractional diffusion in finance: basic theory.* // MDEF2000 – Workshop «Modelli Dinamici in Economia

e Finanza», Urbino (Italy), September 28-30, 2000.

35. Mainardi F., Pagnini G., Gorenflo R. *Some aspects of fractional diffusion equations of single and distributed order.* // Applied Mathematics and Computation, vol. 187, № 1 (2007), pp. 295–305.

36. Metzler R., Klafter J. *The random walker's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach.* // Phys. Reports 339 (2000), 1–77.

37. Sokolov I.M., Klafter J., Blumen A. *Fractional kinetics.* // Physics Today 55, № 11 (2002), pp. 48–54.

38. Chechkin A.V., Gorenflo R., Sokolov I.M. *Retarding subdiffusion and accelerating superdiffusion governed by distributed-order fractional diffusion equation.* // Physical Review E, vol. 66, 046129 (2002).

39. Sokolov I.M., Chechkin A.V., Klafter J. *Distributed-order fractional kinetics.* // 16th Marian Smoluchowski Symposium on Statistical Physics: Fundamentals and Applications (2003).

40. Chechkin A.V., Gorenflo R., Sokolov I.M., Gonchar V.Y. *Distributed-order time fractional diffusion equation.* // Fract. Calc. Appl. Anal. 6 (2003), pp. 259–279.

41. Chechkin A.V., Klafter J., Sokolov I.M. *Fractional Fokker-Planck equation for ultraslow kinetics.* // Europhys. Letters, vol. 63 (2003), pp. 326–332.

42. Sokolov I.M., Chechkin A.V., Klafter J. *Distributed-order fractional kinetics.* // Acta Phys. Polon. 35 (2004), pp. 1323–1341.

43. Sokolov I.M., Klafter J. *From diffusion to anomalous diffusion: a century after Einstein's Brownian motion.* // Chaos 15 (2005), 026103–026109.

44. Korabel N., Klages R., Chechkin A.V., Sokolov I.M., Gonchar V.Y. *Fractal properties of anomalous diffusion in intermittent maps.* // Physical Review E, vol. 75, 036213 (2007).

45. Liu F., Anh V., Turner I., Zhuang P. *Time fractional advection-dispersion equation.* // J. Appl. Math. Computing (2003), pp. 233–246.

46. Liu F., Anh V., Turner I. *Numerical solution of the space fractional Fokker-Planck equation.* // Journal of Computational and Applied Mathematics 166

(2004), pp. 209–219.

47. Zhuang P., Liu F. *Implicit difference approximation for the time fractional diffusion equation.* // J. Appl. Math. Computing 22, № 3 (2006), pp. 87–99.

48. Liu Q., Liu F., Turner I., Anh V. *Approximation of the Levy-Feller advection-dispersion process by random walk and finite difference method.* // J. Phys. Computing 222 (2007), pp. 57–70.

49. Chen S., Liu F., Zhuang P., Anh V. *Finite difference approximations for the fractional Fokker-Planck equation.* // Applied Mathematical Modeling 33 (2009), pp. 256–273.

50. Fix G.J., Roop J.P. *Least squares finite-element solution of a fractional order two-point boundary value problem.* // Computers and Mathematics with Applications 48 (2004), pp. 1017–1033.

51. Ervin V.J., Roop J.P. *Variational formulation for the stationary fractional advection-dispersion equation.* // Numer. Methods for Partial Differential Equations (2005).

52. Roop J.P. *Computational aspects of FEM approximation of fractional advection dispersion equations on bounded domains in R^2 .* // Journal of Computational and Applied Mathematics (2005).

53. Momani S. *An explicit and numerical solutions of the fractional KdV equation.* // Math. Comput. Simul. 70 (2005), pp. 110–118.

54. Momani S., Odibat Z., Erturk V.S. *Generalized differential transform method for solving a space and time-fractional diffusion-wave equation.* // Physics Letters A 370 (2007), pp. 379–387.

55. Momani S., Odibat Z. *Comparison between the homotopy perturbation method and the variational iteration method for linear fractional partial differential equations.* // Computers and Mathematics with Applications 54 (2007), pp. 910–919.

56. Momani S., Odibat Z. *Numerical comparison of methods for solving linear differential equations of fractional order.* // Chaos, Solitons and Fractals 31 (2007), pp. 1248–1255.

57. Hristov J. *Heat-balance integral to fractional (half-time) heat diffusion*

sub-model. // Thermal Science, vol. 14, № 2 (2010), pp. 291–316.

58. Hristov J. *A short-distance integral-balance solution to a strong subdiffusion equation: a weak power-law profile*. // International Review of Chemical Engineering, vol. 2, № 5 (2010), pp. 555–563.

59. Hristov J. *Approximate solutions to fractional subdiffusion equations*. // Eur. Phys. J. Special Topics 193 (2011), pp. 229–243.

60. Hristov J. *Starting radial subdiffusion from a central point through a diverging medium (a sphere): heat-balance integral method*. // Thermal Science, vol. 15, Suppl. 1 (2011), pp. S5–S20.

61. Hristov J. *Thermal impedance at the interface of contacting bodies: 1-D example solved by semi-derivatives*. // Thermal Science, vol. 16, № 2 (2012), pp. 623–627.

62. Hristov J. *Integral-balance solution to the Stokes' first problem of a viscoelastic generalized second grade fluid*. // Thermal Science, vol. 16, № 2 (2012), pp. 395–410.

63. Chaves A. *Fractional diffusion equation to describe Levy flights*. // Phys. Lett. A 239 (1998), pp. 13–16.

64. Govindan Rangarajan, Mingzhou Ding. *Anomalous diffusion and the first passage time problem*. // Physical Review E, vol. 62, № 1 (2000), pp. 120–133.

65. Agrawal O.P. *Solution for a fractional diffusion-wave equation defined in a bounded domain*. // J. Nonlinear Dynamics 29 (2002), pp. 145–155.

66. Srivastava H.M., Saxena R.K. *Operators of fractional integration and their applications*. // Appl. Math. Comput., № 118 (2003), 1–52.

67. Naber M. *Distributed order fractional subdiffusion*. // Fractals, vol. 12 (2004), pp. 23–32.

68. Deng Z., Singh V.P., Bengtsson L. *Numerical solution of fractional advection-dispersion equation*. // Journal of Hydraulic Engineering (2004), pp. 422–431.

69. Bednarik P. *Improved numerical method for multidirectional fractional advection-dispersion equation in 1-D and 2-D with general boundary conditions*. //

Proceedings of the Czech-Japanese Seminar in Applied Mathematics (2006), pp. 9–24.

70. Ciesielski M., Leszczynski J. *Numerical treatment of an initial-boundary value problem for fractional partial differential equations.* // Signal Processing 86 (2006), pp. 1413–1423.

71. Yuste S.B. *Weighted average finite difference methods for fractional diffusion equations.* // Journal of Computational Physics 216 (2006), pp. 264–274.

72. Podlubny I. *Geometric and physical interpretation of fractional integration and fractional differentiation.* // Report TUKE-10-2001 (2007).

73. Ghorbani A. *Toward a new analytical method for solving nonlinear fractional differential equations.* // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 197 (2009), pp. 4173–4179.

74. Vanani S.K., Aminataei A. *On the numerical solution of fractional partial differential equations.* // Mathematical and Computational Applications, vol. 17, № 2 (2012), pp. 140–151.

75. Петухов А.А., Ревизников Д.Л. *Алгоритмы численного решения дробно-дифференциальных уравнений.* // Вестник Московского авиационного института, т. 16, № 6, 2009 г. – М.: Изд-во МАИ, 2009. – 256 с., стр. 228–234.

76. Зосимов В.В., Лямшев Л.М. *Фракталы в волновых процессах.* // Успехи физических наук, т. 165, № 4, 1995 г., стр. 361–402.

77. Корженевский А.Л., Камзина Л.С. *Аномальная диффузия света в сегнетоэлектриках с размытым фазовым переходом.* // Физика твёрдого тела, т. 40, № 8, 1998 г., стр. 1537–1541.

78. Большов Л.А., Головизнин В.М., Дыхне А.М., Киселев В.П., Кондратенко П.С., Семенов В.Н. *Новые подходы к оценке безопасности захоронений радиоактивных отходов.* // Известия Российской академии наук. Энергетика, № 4, 2004 г., стр. 99–108.

79. Паровик Р.И., Ильин И.А., Фирстов П.П. *Обобщённая одномерная модель массопереноса радона-222 и его эксхалация в приземный слой атмосферы.* // Математическое моделирование, т. 19, № 11, 2007 г., стр.

43–50.

80. Мерер Х. Диффузия в твёрдых телах. Монография. Пер. с англ. – Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2011. – 536 с.

81. Berkowitz B., Scher H., Silliman S.E. *Anomalous transport in laboratory-scale, heterogeneous porous media.* // Water Resources Research, 36 (2000), pp. 149–158.

82. Guantes R., Vega J.L., Miret-Artes S. *Chaos and anomalous diffusion of adatoms on solid surfaces.* // Physical Review B, vol. 64, 245415 (2001).

83. Baowen Li, Jiao Wang. *Anomalous heat conduction and anomalous diffusion in one-dimensional systems.* // Physical Review letters, vol. 91, № 4 (2003).

84. Narahari Achar B.N., Hanneken J.V. *Fractional radial diffusion in a cylinder.* // Journal of Molecular Liquids 114 (2004), pp. 147–151.

85. Kosztolowicz T. *Transport in diffusive-subdiffusive system.* // Acta Physica Polonica B 36 (2005), pp. 1635–1639.

86. Baowen Li, Gang Zhang. *Anomalous vibrational energy diffusion in carbon nanotubes.* // The Journal of Chemical Physics 123, 014705 (2005).

87. Baowen Li, Jiao Wang, Lei Wang, Gang Zhang. *Anomalous heat conduction and anomalous diffusion in nonlinear lattices, single walled nanotubes, and billiard gas channels.* // Chaos 15, 015121 (2005).

88. Dworecki K., Slezak A., Ornal-Wasik B., Wasik S. *Evolution of concentration field in a membrane system.* // J. Biochem. Biophys. Methods 62 (2005), pp. 153–162.

89. Li Y., Farrher G., Kimmich R. *Sub- and superdiffusion molecular displacement laws in disordered porous media probed by nuclear magnetic resonance.* // Physical Review E 74, № 6, 066309 (2006).

90. Dworecki K. *Experimental investigation of the subdiffusion in a membrane system.* // Physica A 359 (2006), pp. 24–32.

91. Ardelean I., Farrher G., Kimmich R. *Effective diffusion in partially filled nanoscopic and microscopic pores.* // Journal of Optoelectronics and Advanced Materials 9, № 3 (2007), pp. 655–660.

92. **Kosztolowicz T.** *Subdiffusion in a system with a thick membrane.* // Journal of Membrane Science 320 (2008), pp. 492–499.
93. **Berkowitz B., Scher H.** *Exploring the nature of non-Fickian transport in laboratory experiments.* // Advances in Water Resources 32 (2009), pp. 750–755.
94. **Nuo Yang, Gang Zhang, Baowen Li.** *Violation of Fourier's law and anomalous heat diffusion in silicon nanowires.* // Nano Today 5 (2010), pp. 85–90.
95. **Maruyama Sh.** *CVD growth and heat transfer of carbon nanotubes.* // Proceedings of the 14th International Heat Transfer Conference, August 8-13, 2010, Washington, DC, USA, IHTC14-23350.
96. **Сластушенский Ю.В.** *Алгоритмы численного решения дифференциальных уравнений с дробными производными.* // Технологии Microsoft в теории и практике программирования: Тр. VI Всерос. конф. студентов, аспирантов и молодых учёных. – М.: Вузовская книга, 2009. – 200 с., стр. 179–180.
97. **Ревизников Д.Л., Сластушенский Ю.В.** *Подходы к моделированию аномальной диффузии на микро- и макроуровне.* // Материалы VIII Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ`2010) – М.: МАИ-ПРИНТ, 2010, – 624 с., стр. 142–145.
98. **Ревизников Д.Л., Петухов А.А., Сластушенский Ю.В.** *Описание аномальной диффузии с использованием дробно-дифференциальных уравнений и метода дискретных элементов.* // Материалы XVII Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСПСС`2011). – М.: МАИ-ПРИНТ, 2011, – 832 с., стр. 601–602.
99. **Ревизников Д.Л., Сластушенский Ю.В.** *Применение дробно-дифференциального исчисления для описания аномальной диффузии.* // Вестник Московского авиационного института, т. 18, № 4, 2011 г. – М.: Изд-во МАИ, 2011. – 136 с., стр. 76–82.
100. **Сластушенский Ю.В.** *Модель случайного блуждания для уравнения аномальной диффузии.* // Научно-технический вестник Поволжья, №

5, 2011 г. – Казань: Научно-технический вестник Поволжья, 2011. – 285 с., стр. 242–246.

101. Сластушенский Ю.В. *Подходы к моделированию процессов аномальной диффузии.* // Инновации в авиации и космонавтике – 2012. Сборник тезисов докладов. – М.: ООО «Принт-салон», 2012. – 334 с., стр. 250–251.

102. Ревизников Д.Л., Сластушенский Ю.В. *Моделирование аномальной диффузии на примере модели бильярдного газа в канале.* // Материалы IX Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ 2012). – М.: Изд-во МАИ, 2012. – 656 с., стр. 512–515.

103. Ревизников Д.Л., Сластушенский Ю.В. *Численное моделирование аномальной диффузии бильярдного газа в полигональном канале.* // Математическое моделирование, № 5, 2013 г., стр. 3–14. (статья принята к публикации).

104. Формалев В.Ф., Ревизников Д.Л. *Численные методы.* – М.: Физматлит, 2004.

105. Пирумов У.Г. *Численные методы: Учебное пособие для студ. вузов.* – М.: Дрофа, 2007.

106. Самарский А.А., Гулин А.В. *Численные методы.* – М.: Наука, 1989.

107. Пантелеев А.В., Летова Т.А. *Методы оптимизации в примерах и задачах.* – М.: Высшая школа, 2008.