

На правах рукописи

Сластушенский Юрий Викторович

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

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

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2013

Работа выполнена на кафедре вычислительной математики и программирования ФГБОУ ВПО «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)».

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

Официальные оппоненты: Черкасов Сергей Гелиевич,
доктор физико-математических наук,
профессор, главный научный сотрудник
ГНЦ ФГУП «Исследовательский центр
имени М.В. Келдыша»

Рыбин Владимир Васильевич,
кандидат технических наук, доцент,
доцент кафедры математической
кибернетики ФГБОУ ВПО «Московский
авиационный институт»

Ведущая организация: ФГБУН «Институт прикладной
математики им. М.В. Келдыша Российской
академии наук»

Защита состоится «01» марта 2013 года в 10 часов 00 минут на заседании диссертационного совета Д 212.125.04 при ФГБОУ ВПО «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)» по адресу 125993, г. Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, д. 4.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке ФГБОУ ВПО «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)».

Автореферат разослан «__» _____ 2013 г.

Учёный секретарь
диссертационного совета Д 212.125.04,
кандидат физико-математических наук

Северина Н.С.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

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, 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 принята к публикации. Список публикаций приведён в конце автореферата.

Структура и объём 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.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

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.

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.

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

$$\frac{\partial^\gamma c(x,t)}{\partial t^\gamma} = D \frac{\partial^\alpha c(x,t)}{\partial x^\alpha}, \quad (1)$$

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 $1 < \alpha \leq 2$.

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):

$$\frac{\partial^\alpha c(x,t)}{\partial x^\alpha} = C_+ \frac{\partial_+^\alpha c(x,t)}{\partial x^\alpha} + C_- \frac{\partial_-^\alpha c(x,t)}{\partial x^\alpha}, \quad (2)$$

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

Необходимые односторонние дробные производные произвольных порядков α и γ определяются формулами Римана-Лиувилля для дробной производной Лиувилля и Вейля:

$$\frac{\partial^\gamma c(x,t)}{\partial t^\gamma} = \frac{\partial_+^\gamma c(x,t)}{\partial t^\gamma} = \frac{1}{\Gamma([\gamma]+1-\gamma)} \frac{d^{[\gamma]+1}}{dt^{[\gamma]+1}} \int_{-\infty}^t (t-\tau)^{[\gamma]-\gamma} c(x,\tau) d\tau, \quad (3)$$

$$\frac{\partial_+^\alpha c(x,t)}{\partial x^\alpha} = \frac{1}{\Gamma([\alpha]+1-\alpha)} \frac{d^{[\alpha]+1}}{dx^{[\alpha]+1}} \int_{-\infty}^x (x-\tau)^{[\alpha]-\alpha} c(\tau,t) d\tau, \quad (4)$$

$$\frac{\partial_-^\alpha c(x,t)}{\partial x^\alpha} = \frac{(-1)^{[\alpha]+1}}{\Gamma([\alpha]+1-\alpha)} \frac{d^{[\alpha]+1}}{dx^{[\alpha]+1}} \int_x^{+\infty} (\tau-x)^{[\alpha]-\alpha} c(\tau,t) d\tau, \quad (5)$$

Диффузия рассматривается на всём одномерном пространстве (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 (1) отвечает за появление субдиффузии – при $\alpha = 2$ уравнение (1) описывает аномальную диффузию с зависимостью $\langle r^2 \rangle \sim t^\gamma$. Параметр α отвечает за появление супердиффузии – при $\gamma = 1$ уравнение (1) описывает аномальную диффузию с зависимостью $\langle r^2 \rangle \sim t^{2/\alpha}$. Комбинация обоих параметров в уравнении (1) 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 (1) описывает классическую диффузию.

В силу сложности дробно-дифференциальных уравнений нахождение аналитических решений рассматриваемого класса задач затруднительно. Поэтому в работе применялись численные методы решения задачи. Использовались два сорта методов: метод конечных разностей и метод случайного блуждания.

Конечно-разностные методы решения дробно-дифференциальных уравнений типа (1) основаны на аппроксимации дробных производных на координатных сетках с шагами h и τ по пространству и времени соответственно с использованием формул Грюнвальда-Летникова:

$$\frac{\partial_+^\gamma c(x,t)}{\partial t^\gamma} = \frac{1}{\Gamma(-\gamma)} \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau^\gamma} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(k-\gamma)}{\Gamma(k+1)} c(x, t-k\tau), \quad (6)$$

для дробной производной по времени,

$$\frac{\partial_+^\alpha c(x,t)}{\partial x^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(-\alpha)} \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(k-\alpha)}{\Gamma(k+1)} c(x-kh, t), \quad (7)$$

для левосторонней дробной производной по пространству, и

$$\frac{\partial_-^\alpha c(x,t)}{\partial x^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(-\alpha)} \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(k-\alpha)}{\Gamma(k+1)} c(x+kh,t), \quad (8)$$

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 (6) – (8), дробные производные уравнения (1) будут аппроксимированы в узлах сетки (x_i, t_n) следующим образом:

$$\frac{\partial^\gamma c(x_i, t_n)}{\partial t^\gamma} = \frac{\partial_+^\gamma c(x_i, t_n)}{\partial t^\gamma} = \frac{1}{\tau^\gamma} \sum_{k=0}^{\infty} g_{\gamma,k} c(x_i, t_{n-k}) + O(\tau), \quad (9)$$

$$\frac{\partial_+^\alpha c(x_i, t_n)}{\partial x^\alpha} = \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^{i+1} g_{\alpha,k} c(x_{i-k+1}, t_n) + O(h), \quad (10)$$

$$\frac{\partial_-^\alpha c(x_i, t_n)}{\partial x^\alpha} = \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^{K-i-1} g_{\alpha,k} c(x_{i+k+1}, t_n) + O(h), \quad (11)$$

$$\frac{\partial^\alpha c(x_i, t_n)}{\partial x^\alpha} = C_+ \cdot \frac{\partial_+^\alpha c(x_i, t_n)}{\partial x^\alpha} + C_- \cdot \frac{\partial_-^\alpha c(x_i, t_n)}{\partial x^\alpha}. \quad (12)$$

где $g_{\alpha,k} = \frac{\Gamma(k-\alpha)}{\Gamma(-\alpha)\Gamma(k+1)}$ – нормированные веса Грюнвальда–Летникова.

Изложенный подход позволяет строить явные и неявные конечно-разностные схемы для дробно-дифференциальных уравнений. 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.

Для повышения порядка точности численного решения дробно-дифференциального уравнения в настоящей работе была использована идея метода Рунге–Ромберга–Ричардсона, основанная на использовании дробных сеток. В этом случае, обладая механизмом повышения порядка точности численного решения задачи на единицу, можно составить пирамидальный алгоритм, позволяющий численно решать дифференциальные уравнения с дробными производными с произвольным порядком точности.

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.

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 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).

Запишем уравнение (1) в дискретном виде, воспользовавшись формулами (9) – (12) 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 $y_i(t_n) = \frac{1}{C_0} \cdot \int_{x_i-h/2}^{x_i+h/2} c(x, t_n) dx = \frac{1}{C_0} \cdot h \cdot c(x_i, t_n)$:

$$\frac{\partial^\gamma y(x_i, t_n)}{\partial t^\gamma} = D \cdot (C_+ \cdot \frac{\partial^\alpha y(x_i, t_{n-1})}{\partial x^\alpha} + C_- \cdot \frac{\partial^\alpha y(x_i, t_{n-1})}{\partial x^\alpha}) \quad (13)$$

$$\frac{1}{\tau^\gamma} \sum_{m=0}^{\infty} g_{\gamma, m} y_{i, n-m} = D \cdot (C_+ \cdot \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^{\infty} g_{\alpha, k} y_{i-k+1, n-1} + C_- \cdot \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^{\infty} g_{\alpha, k} y_{i+k-1, n-1}) \quad (14)$$

$$y_{i, n} = \gamma \cdot y_{i, n-1} - \sum_{m=2}^{\infty} g_{\gamma, m} y_{i, n-m} + D \cdot \frac{\tau^\gamma}{h^\alpha} (C_+ \cdot \sum_{k=0}^{\infty} g_{\alpha, k} y_{i-k+1, n-1} + C_- \cdot \sum_{k=0}^{\infty} g_{\alpha, k} y_{i+k-1, n-1}) \quad (15)$$

Уравнение (15) 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:

$$y_i(t_n) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} p_k y_{i-k}(t_{n-1}) + \sum_{m=2}^{+\infty} q_m y_i(t_{n-m}). \quad (16)$$

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).

После группировки слагаемых в выражении (15) в соответствии с формулой (16) соответствующие вероятности прыжков p по пространству и q по времени можно определить ($m \geq 2$):

$$\left\{ \begin{array}{l} p_0 = \gamma - D \cdot \frac{\tau^\gamma}{h^\alpha} (C_+ + C_-) \cdot \alpha \\ p_{\pm 1} = D \cdot \frac{\tau^\gamma}{h^\alpha} \left(\frac{\alpha(\alpha-1)}{2} C_\pm + C_\mp \right) \pm V \cdot \frac{\tau^\gamma}{2h} \\ p_{\pm k} = D \cdot \frac{\tau^\gamma}{h^\alpha} \cdot g(\alpha, k+1) \cdot C_\pm \\ q_m = -g(\gamma, m) \end{array} \right. \quad (17)$$

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

Следует обратить внимание на то, что в формулах (13) – (15) (как и в формуле (9) 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:

$$\sum_{m=2}^{\infty} g_{\gamma, m} y_{i, n-m} = \sum_{m=2}^n g_{\gamma, m} y_{i, n-m} + \sum_{m=n+1}^{\infty} g_{\gamma, m} y_{i, n-m} = \sum_{m=2}^n g_{\gamma, m} y_{i, n-m} - y_{i, 0} \sum_{m=0}^n g_{\gamma, m}. \quad (18)$$

Ниже на рис. 1 приведён пример решения задачи Коши с начальным условием $c(x, 0) = C_0 \cdot \delta(x)$ для уравнения аномальной диффузии (1) 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 и случайного блуждания (10^7 симуляций). Наблюдается хорошее согласование обоих решений.

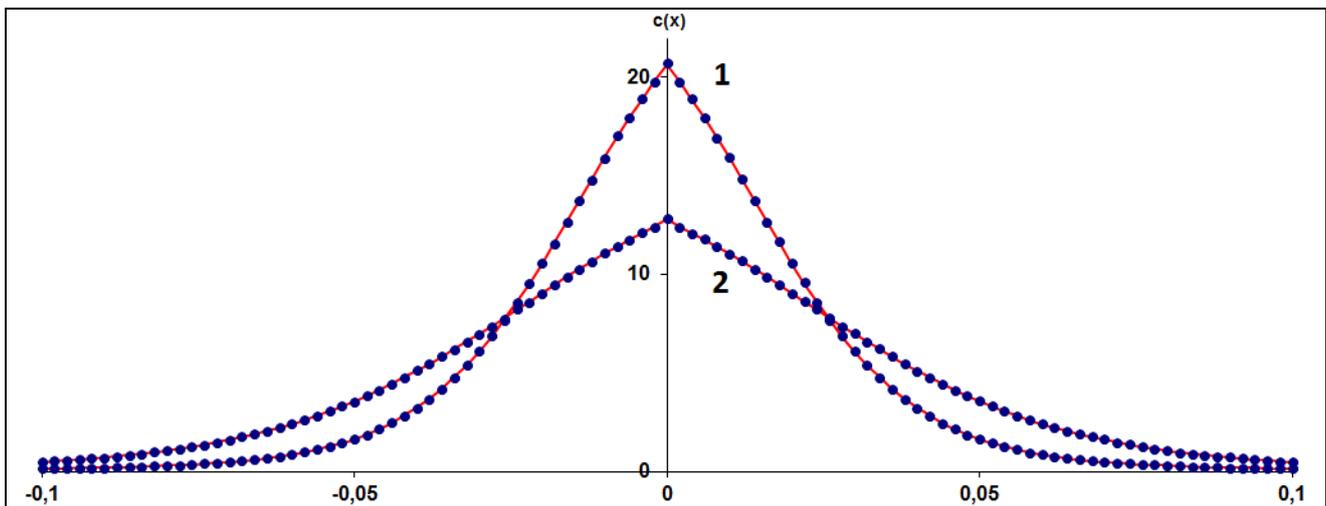


Рис. 1. Сравнение на участке $[-0.1; 0.1]$ численных решений уравнения (1) в моменты времени $t = 2$ (график 1) и $t = 5$ (график 2) различными методами: конечно-разностным (сплошная кривая) и случайного блуждания (выделено маркерами)

Кроме того, следует отметить, что, 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.

Таким образом, в первой главе 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.

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 (1).

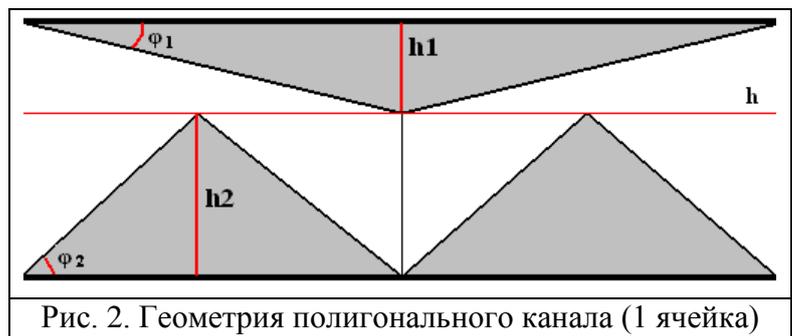
Одним из ярких представителей систем с аномальной диффузией на микроуровне является модель бильярдного газа в специально профилированном канале, содержащем препятствия некоторой формы на обеих его стенках вдоль всей своей длины. В нём происходит равномерное и прямолинейное движение ансамбля частиц с зеркальным отражением от стенок. Различные каналы отличаются геометрической конфигурацией, которая влияет на итоговые диффузионные свойства бильярдного газа.

Одной из наиболее интересных конфигураций с точки зрения изучения аномальных диффузионных свойств является модель полигонального канала для бильярдного газа. Геометрия данного канала показана ниже на рис. 2.

Ширина канала определяется как

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

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. 3 можно видеть соответствующие этим случаям значения характеристики диффузии $p = 1.27, 0.75$ и 1 .

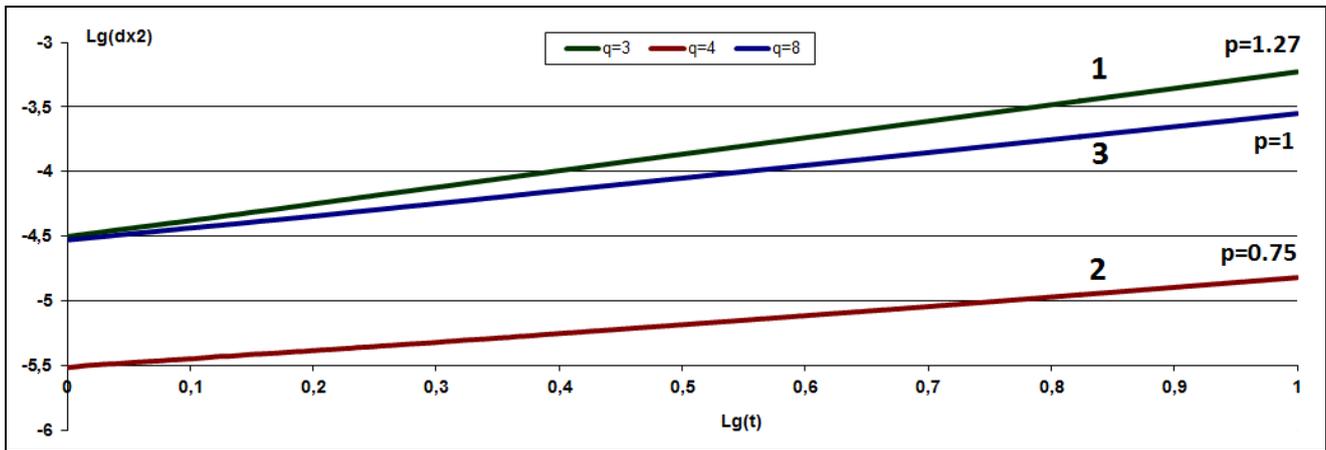


Рис. 3. Зависимости $\langle \Delta x^2 \rangle \sim t^p$ для $q = 3$ (линия 1), $q = 4$ (линия 2) и $q = 8$ (линия 3) на временном интервале $1 \leq t \leq 10$ в логарифмической шкале [20 000 000 частиц]

Для описания одномерной аномальной диффузии бильярдного газа в полигональном канале на макроуровне будем использовать дробно-дифференциальное уравнение (1) с подлежащими определению параметрами α , γ , D . 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: $c(x, 0) = C_0 \cdot \delta(x)$.

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, решалась задача минимизации функции ошибки:

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 = \sum_{i=-K}^K \sum_{n=N/4}^N \left(\frac{c'_{in} - c_{in}}{c_{0n}} \right)^2 + (2K+1) \sum_{n=N/4}^N \left(\frac{c'_{0n} - c_{0n}}{c_{0n}} \right)^2 \quad (19)$$

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.

Таким способом были подобраны приблизительные значения параметров α , γ , D уравнения (1) для каждой из семи изученных конфигураций канала $3 \leq q \leq 9$. Для всех рассмотренных вариантов решение каждого полученного уравнения аномальной диффузии достаточно точно описывает пространственно-временную эволюцию диффундирующих частиц в соответствующем полигональном канале.

Например, в канале с $q = 3$ наблюдается установление к сильной супердиффузии.

Диффузионный процесс в этом случае хорошо описывается уравнением (1) с параметрами $\alpha \approx 1.341$, $\gamma \approx 0.952$ и $D \approx 5.865 \cdot 10^{-4}$ (рис. 4). 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.

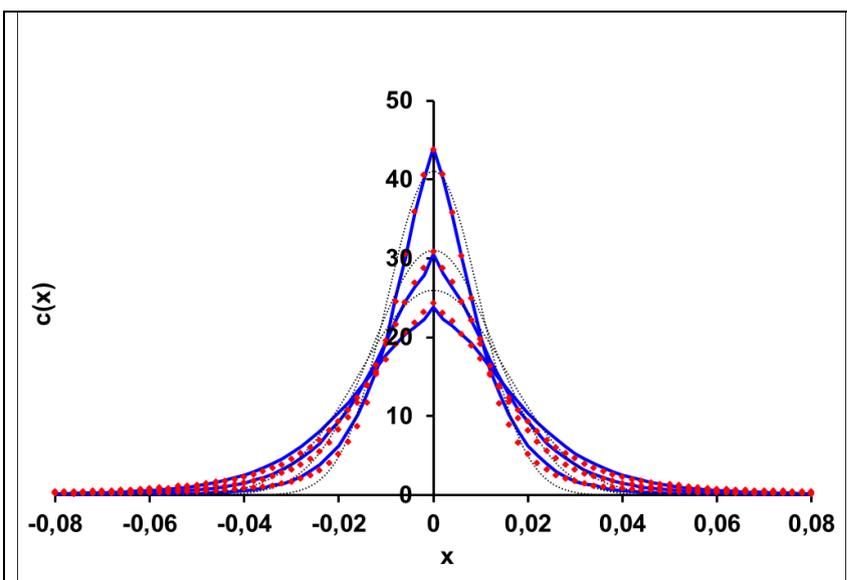


Рис. 4. Распределение концентрации диффундирующих частиц для $q = 3$ (сплошная кривая) и решение уравнения (выделено маркерами) в моменты времени $t = 0.4T$, $t = 0.7T$ и $t = T$ (пунктирная кривая отражает распределение Гаусса)

Таким образом, 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.

Как показывают физические эксперименты по наблюдению диффузионных процессов в твёрдых телах, у различных классов материалов наблюдаются каналы ускоренной диффузии (по границам зёрен и дислокациям). 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. 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:

$$\Phi(r) = 4E \cdot \left[\left(\frac{d}{r} \right)^{12} - \left(\frac{d}{r} \right)^6 \right], \quad (20)$$

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

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.

Потенциальное силовое поле используется только с целью определения направления движения частицы, а её кинетическая энергия поддерживается постоянной и равной стартовой. 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 неккими константами.

Все частицы ансамбля изначально располагаются 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 и постоянен. Стартовое направление движения частицы случайно, все направления равновероятны.

В качестве примера рассмотрим регулярное начальное расположение структурных элементов среды, т.е. с постоянными заданными интервалами по пространству (по длине h_x и ширине h_y), когда расположение СЭ зафиксировано и симметрично относительно оси x в канале. Пусть $h_x = h_y = \lambda d, \lambda > 0$.

Ширина канала H задана в единицах h_y дискретным параметром числа рядов СЭ в канале B : $H = Bh_y = B\lambda d, B \geq 1$.

Исследуется диффузия в канале с несколькими рядами СЭ (B) при небольших значениях λ (при которых наблюдается нормальная диффузия), но

при этом в нём сделаны вырезы, т.е. несколько рядов ($A < B$) убраны из центра канала. Отсутствие центральных рядов СЭ приводит к супердиффузии, пространственную аномалию можно наблюдать, например, при $B = 5$, $A = 3$, где прямое моделирование дает $p \approx 1.13$. Этот процесс можно описать уравнением (1) с дробной производной по пространству порядка $\alpha = 1.84$.

На этом примере также можно отдельно отметить наличие «тяжёлых» степенных хвостов, характерных именно для супердиффузии (рис. 5).

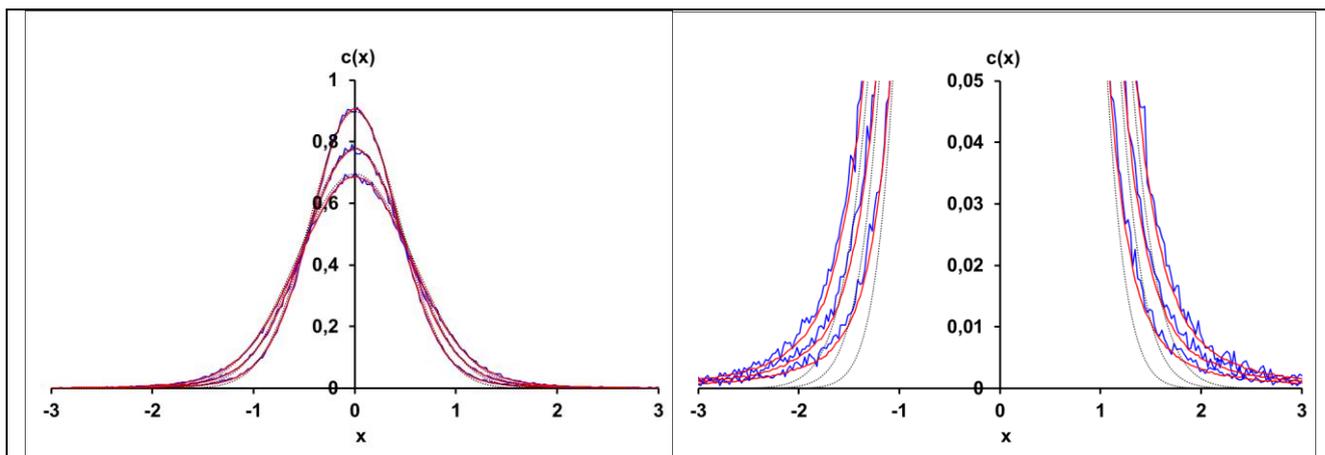


Рис. 5. Распределение концентрации диффундирующих частиц для $B = 5$, $A = 3$ (синяя кривая) и решение уравнения (красная кривая) в моменты времени $t = 0.6T$, $t = 0.8T$ и $t = T$ (пунктирная кривая отражает распределение Гаусса)

Таким образом, в третьей главе 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.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ

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.

ОПУБЛИКОВАННЫЕ РАБОТЫ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи в научных журналах из перечня ВАК РФ

1. **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.

2. **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.

3. **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).

Материалы статей и научных конференций

4. **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.

5. **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.

6. **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.

7. **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.

8. **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.