

Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Новосибирский государственный технический университет»

На правах рукописи



Пехтерева Лина Вадимовна

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРОЦЕССОВ СУБДИФФУЗИИ

Специальность 05.13.18 –
«Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ»

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Научный руководитель:
к.ф.-м.н., доцент
Ковалевский А.П.

Новосибирск – 2008

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	4
ГЛАВА 1. CTRW-МОДЕЛИ СУБДИФфуЗИИ НА ЕВКЛИДОВЫХ РЕШЕТКАХ	15
1.1. Вспомогательные сведения о пространстве обобщенных функций медленного роста	16
1.2. Общее интегральное уравнение CTRW-модели	21
1.3. Построение и исследование CTRW-модели (В) субдиффузии на евклидовой решетке	26
1.4. Уравнение динамики концентрации с заданной функцией задержки при наличии источников и стоков	39
1.5. Прямое стохастическое моделирование субдиффузии в R^n ($n=1,2,3$)..	45
1.6. Сходимость последовательности концентраций при увеличении числа испытаний	48
ГЛАВА 2. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ СУБДИФфуЗИИ НА ЕВКЛИДОВЫХ РЕШЕТКАХ	53
2.1. Численное решение интегроразностного уравнения субдиффузии в R^1	53
2.2. Численное решение интегроразностного уравнения субдиффузии в R^2	69
2.3. Численное решение интегроразностного уравнения субдиффузии в R^3	82
2.4. Численная реализация стохастической имитационной модели субдиффузии	91
2.5. Сравнение численных моделей	94

ГЛАВА 3. ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ СУБДИФФУЗИИ	96
3.1. Описание интерфейса программы для численной реализации субдиффузии с источниками.....	97
3.2. Алгоритм вычисления концентрации методом прямого стохастического моделирования	101
3.3. Алгоритм вычисления концентрации методом численной аппроксимации уравнения субдиффузии	109
3.4. Сравнение алгоритмов численной реализации субдиффузии.....	117
3.5. Определение среднего квадрата перемещения частиц	119
3.6. Программа для построения траекторий стохастического блуждания частиц	122
ГЛАВА 4. STRW-МОДЕЛИРОВАНИЕ СУБДИФФУЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ПОРИСТЫХ СРЕДАХ ДРОБНОЙ РАЗМЕРНОСТИ	123
4.1. Моделирование субдиффузии в поровом пространстве дробной размерности STRW-моделью субдиффузии на евклидовой решетке	124
4.2. Определение ширины диффузионного пакета для процесса субдиффузии в поровом пространстве дробной размерности	129
4.3. Оценки параметров перколяционных процессов на основе STRW- модели	130
4.4. Об одной численной реализации фрактального броуновского движения	133
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	139
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	141
Приложение 1	149

ВВЕДЕНИЕ

Современное состояние и актуальность темы исследований.

Поровое пространство многих встречающихся в природе и технике пористых материалов представляет собой сложную геометрическую структуру, моделирование которой возможно только самоподобными или самоаффинными геометрическими множествами дробной размерности, [3,7,9,21,23,24,47,58]. Диффузия в таких средах является аномальной: для больших значений времени t средний квадрат перемещения растет по закону, [11,49,64],

$$\lim_{t \gg \tau_0} \langle r^2(t) \rangle = D_\alpha t^\alpha, \quad \alpha \neq 1,$$

где D_α – коэффициент диффузии, α – показатель аномальности диффузии, τ_0 определяется в зависимости от задачи.

Случай $\alpha < 1$ характеризуется запаздыванием роста среднего квадрата перемещения по времени и называется субдиффузией. Субдиффузия наблюдается в ряде таких горных пород, как песчаник, угольные пласты, [3], в средах с аэрогельной структурой, [47], а также торфяниках, [21], и других материалах, [11,24].

В настоящий момент *неизвестно, как устроены математические модели аномальной диффузии в средах с поровым пространством F дробной размерности. Эти модели должны удовлетворять закону аномальности и обладать тем свойством, что концентрация диффундирующего вещества должна определяться блужданием частиц на множестве F дробной размерности с определенными геометрическими свойствами.*

Поэтому возникает актуальная задача построения математической модели субдиффузии на множествах F дробной размерности.

Известными математическими моделями аномальной диффузии в настоящее время являются:

– модель фрактального броуновского движения (ФБД) в R^n , введенная Б.Мандельбротом, [76];

- модель, описываемая эволюционным уравнением в R^n с дробной производной по времени, [78,82,95];
- модель непрерывного по времени случайного блуждания Continuous Time Random Walk (CTRW-модель), [66,73,74].

Отмеченные модели не содержат постановки задачи определения концентрации диффундирующего вещества как решения какого-либо уравнения или реализации стохастической модели по начальной концентрации и каким-либо геометрическим и физическим характеристикам среды.

Данная диссертационная работа посвящена математическому моделированию и численной реализации моделей субдиффузии в рамках *CTRW-модели*. Разработана CTRW-модель диффузии на евклидовой решетке с постоянным шагом перемещения и задержками определенного класса. Доказано, что для всех задержек этого класса распределения концентрации являются решениями уравнения CTRW-модели, асимптотически эквивалентными при больших временах, и зависящими от параметров аномальной диффузии D_α и α .

Это позволяет строить имитационные модели процессов субдиффузии в конкретных материалах и изучать процесс субдиффузии в зависимости от геометрической характеристики связности их порового пространства.

Сформулируем основные цели исследования и задачи, которые решаются для их достижения.

Цели и задачи исследования.

1. Математическое моделирование процессов субдиффузии на основе CTRW-модели.

Для достижения этой цели решаются следующие задачи:

- разработка метода выделения случая субдиффузии в CTRW-модели;
- построение модели субдиффузии на евклидовой решетке с постоянным шагом;
- построение прямой имитационной стохастической модели субдиффузии;

- имитирование субдиффузии на множествах дробной размерности в рамках CTRW-модели.
2. Разработка и программная реализация численных моделей процессов субдиффузии. Для достижения этой цели решаются следующие задачи:
- разработка численных методов решения уравнения субдиффузии на евклидовой решетке;
 - построение экономичных численных схем расщепления для решения интегроразностного уравнения;
 - разработка метода прямого стохастического моделирования субдиффузии;
 - создание комплекса программ для реализации разработанных численных методов.

Методы исследования. Для решения поставленных задач используются: методы теории функций, методы функционального анализа, методы математического моделирования, численные методы, методы теории вероятностей и статистического моделирования.

Научная новизна диссертационной работы. В рамках диссертационного исследования получены следующие новые результаты:

1. Построена CTRW-модель субдиффузии (B), реализующая блуждание частиц с постоянным шагом и задержками на евклидовых решетках в R^n ($n=1,2,3$). Для этой модели выведено интегроразностное уравнение динамики концентрации, для которого доказана теорема существования и единственности решения.
2. Для построенной модели субдиффузии (B) найден класс $\mathcal{P}$ функций плотности вероятности задержки, в котором доказана теорема асимптотической единственности концентрации. Установлены необходимые и достаточные условия принадлежности этому классу.
3. Разработаны методы численного решения интегроразностного уравнения субдиффузии на евклидовых решетках в R^n :
 - метод, основанный на дискретизации уравнения субдиффузии ($n=1,2,3$);

- метод, основанный на экономичных численных схемах расщепления ($n=2,3$).
- 4. Разработан метод прямого стохастического моделирования субдиффузии на евклидовых решетках в R^n ($n=1,2,3$).
- 5. Построенная CTRW-модель субдиффузии на евклидовой решетке применена для имитации процесса диффузии в пористых средах дробной размерности с ненулевой связностью.

Основные положения, выносимые на защиту.

1. Математическое моделирование субдиффузии на основе CTRW-модели.
2. Методы численного решения уравнения CTRW-модели субдиффузии и их программная реализация.
3. Метод прямого стохастического моделирования субдиффузии и его программная реализация.
4. Применение CTRW-модели субдиффузии на евклидовой решетке для имитации диффузии в пористых средах дробной размерности с ненулевой связностью.

Обоснованность и достоверность научных положений, выводов и рекомендаций обеспечивается:

- принципами построения и критериями применимости CTRW-модели для описания субдиффузии;
- применением аналитических методов обоснования сходимости решения численных схем к решению интегрального уравнения субдиффузии;
- обоснованием сходимости стохастических реализаций CTRW-модели к решению интегрального уравнения субдиффузии;
- подтверждением аналитических выводов результатами компьютерного моделирования.

Теоретическая значимость результатов:

- разработан новый подход моделирования субдиффузии в рамках CTRW-модели;

- установлены необходимые и достаточные условия реализации процесса субдиффузии на евклидовых решетках с точностью до асимптотической эквивалентности;
- построена численная аппроксимация уравнения CTRW-модели субдиффузии и доказана ее сходимость;
- обоснована корректность метода прямого стохастического моделирования субдиффузии;
- выведены необходимые и достаточные условия реализации модели субдиффузии начальной задачей для неоднородного дифференциального уравнения с дробной производной по времени;
- разработаны новые методы численного решения неоднородного дифференциального уравнения с дробной производной по времени, описывающего субдиффузионные процессы;
- построена имитационная CTRW-модель субдиффузионного процесса на множестве дробной размерности с ненулевой связностью.

Практическая ценность результатов. Для построенной математической модели субдиффузии создан комплекс программ, реализующий разработанные методы численного моделирования субдиффузии, который позволяет:

- имитировать процесс субдиффузии при больших значениях времени в материалах со сложной геометрией порового пространства по двум характеристикам: коэффициенту диффузии и параметру связности (к таким материалам относятся торф, уголь, графит, некоторые виды песчаника);
- установить значения функции концентрации в процессе субдиффузии с источниками;
- определить ширину субдиффузионного пакета в зависимости от времени;
- определить основные параметры перколяционного процесса, описываемого CTRW-моделью субдиффузии.

Апробация работы. Основные результаты исследований докладывались на: 9-й Российско-Корейской международной конференции KoRus

2005; Всероссийских научных конференциях студентов, аспирантов и молодых ученых «Наука. Технологии. Инновации.» НТИ-2003, НТИ-2005, НТИ-2006, НТИ-2007; 63-й научно-технической конференции НГАСУ - 2006, Всероссийском семинаре «Современные проблемы теоретической и прикладной механики», 2006; научных семинарах профессора В.А. Селезнева, НГТУ; научных семинарах профессора В.Я. Рудяка, НГАСУ.

Публикации. По результатам диссертационных исследований опубликовано 14 работ, в том числе: 2 статьи в журналах, входящих в перечень изданий, рекомендуемый ВАК РФ, 8 статей в сборниках научных трудов и 4 работы в сборниках трудов конференций.

Структура работы. Диссертация изложена на 162 страницах, и состоит из введения, 4 глав, заключения, списка использованных источников (97 наименований) и 1 приложения и содержит 34 рисунка и 8 таблиц.

Краткое содержание работы.

В первой главе в рамках известной CTRW-модели, [73], [78], выводится уравнение динамики концентрации для процесса субдиффузии на евклидовой решетке и строится прямая стохастическая модель этого процесса. Основным результатом этой главы заключается в построении такой математической модели субдиффузии, которая позволит по двум характеристикам – коэффициенту диффузии и параметру связности порового пространства – определить распределение концентрации при больших значениях времени.

В п.1.1 приводятся необходимые в работе сведения о классе обобщенных функций медленного роста.

В п.1.2 структура CTRW-модели формируется в виде системы аксиом (A), на ее основе излагается вывод общего интегрального уравнения CTRW-модели диффузии и доказывается теорема о существовании единственного решения этого уравнения в классе непрерывных функций.

В п.1.3 строится CTRW-модель субдиффузии – определяются условия на параметры модели (A), при выполнении которых процесс является субдиффузионным (лемма 1.23). На основе общей CTRW-модели диффузии (A)

формируется система аксиом (В), определяющая модель субдиффузии на равномерных евклидовых решетках в R^n , $n=1,2,3$, и строится интегроразностное уравнение динамики концентрации в CTRW-модели (В). Получено необходимое и достаточное условие, определяющее класс $\mathcal{P}$ функций плотности вероятности задержки для этой модели (теорема 1.24). Доказано утверждение 1.25 об асимптотической эквивалентности концентраций, отвечающих заданному начальному условию и любой функции задержки из класса $\mathcal{P}$.

В п.1.4 исследуется процесс субдиффузии с источниками и стоками. Для него выведено уравнение выравнивания концентрации и получены формулы для определения закона роста среднего квадрата перемещения для различных типов источников (теоремы 1.28-1.33).

В п.1.5 построена прямая стохастическая имитационная модель субдиффузии как прямая реализация блуждания частиц на равномерной решетке в R^n с заданной функцией плотности вероятности задержки частиц в соответствии с системой аксиом (В). Рассмотрены случаи источников и стоков. Получена оценка количества частиц, требуемых для реализации модели (В).

В п.1.6 приводится обоснование прямой стохастической имитационной модели диффузии: здесь показано, что функция концентрации, полученная в результате реализации прямого блуждания частиц, при увеличении количества блуждающих частиц сходится по вероятности к решению интегрального уравнения диффузии (теорема 1.35). Для стохастической модели субдиффузии выведена вероятностная оценка требуемого для моделирования количества частиц при заданной погрешности отклонения стохастической реализации от решения интегроразностного уравнения субдиффузии (леммы 1.36, 1.37).

Во второй главе разработаны и обоснованы методы численной реализации модели (В) субдиффузии на евклидовых решетках: метод дискретизации интегроразностного оператора в уравнении динамики концентрации, метод аппроксимации интегроразностного уравнения схемами расщепления и метод прямого блуждания частиц. Эти методы позволили

разработать описанный в главе 3 комплекс программ для компьютерного имитирования процессов субдиффузии в материалах со сложной геометрией порового пространства.

В п.2.1 строится численное решение интегроразностного уравнения динамики концентрации частиц в R^1 . Решаются задачи с тремя видами краевых условий: условие непротекания на границах, условие периодичности границ и отсутствие граничных условий. Интегроразностное уравнение динамики концентрации аппроксимировано численной схемой на основе квадратурной формулы трапеций, схема имеет второй порядок аппроксимации и первый порядок сходимости (теорема 2.6). Выявлено, что численные схемы первого порядка точности неприменимы для решения нашей задачи, так как для них отсутствует сходимость (замечание 2.7).

П.2.2-2.3 посвящены численному решению интегроразностного уравнения динамики концентрации частиц в R^2 и R^3 соответственно. Сначала строится численная схема для аппроксимации интегроразностного уравнения на основе квадратурной формулы трапеций, имеющая второй порядок аппроксимации и первый порядок сходимости (теоремы 2.10, 2.15). Но эта схема оказывается неэкономичной, и поэтому для решения задач в R^2 и R^3 построены экономичные численные схемы расщепления с таким же порядком аппроксимации и сходимости (теоремы 2.12, 2.17).

В п.2.4 представлена численная реализация прямой стохастической имитационной модели субдиффузии, построенной и обоснованной в п.1.5-1.6. Эта реализация позволяет, во-первых, визуально отслеживать перемещение частиц в процессе субдиффузии, а во-вторых, определить значение функции концентрации.

В п.2.5 приводится сравнение эффективности моделирования субдиффузии методами численного решения уравнения субдиффузии (п.2.1-2.3) и прямого стохастического моделирования (п.2.4). Выведена формула (2.38) для определения отношения временных затрат на реализацию методов числен-

ного решения уравнения субдиффузии и метода прямого стохастического моделирования, что позволяет сравнивать эффективность методов для каждой конкретной задачи.

В главе 3 строятся вычислительные алгоритмы и разрабатываются программы для численной реализации модели субдиффузии (В) в R^1-R^3 .

В п.3.1 описан интерфейс программы, разработанной для численной реализации модели (В) субдиффузии с источниками в R^1-R^3 .

В п.3.2 строится алгоритм определения функции концентрации, основанный на методе прямого стохастического моделирования субдиффузии, приводятся оценки погрешности решения в зависимости от количества частиц и от времени процесса субдиффузии.

В п.3.3 разрабатывается алгоритм определения функции концентрации, основанный на численных методах решения уравнения субдиффузии, приводятся оценки погрешности решения.

В п.3.4 приведено сравнение временных затрат на реализацию предложенных алгоритмов и указаны значения расхождения между функциями концентрации, полученными предложенными методами.

В п.3.5 рассматривается вычисление среднего квадрата перемещения частиц в R^1-R^3 для прямой стохастической модели субдиффузии и для модели субдиффузии, описанной уравнением (1.24). Показано, что эти модели реализуют требуемую аномальную кинетику субдиффузии (1.7).

В п. 3.6 описана программа, разработанная для построения траекторий блуждания частиц в R^1-R^2 .

В главе 4 строится математическая модель субдиффузионных процессов в средах с поровым пространством дробной размерности и ненулевой связности на основе разработанной в главах 1-2 CTRW-модели субдиффузии на евклидовой решетке.

В п.4.1 показано, что распределение концентрации на множестве дробной размерности с ненулевой связностью моделируется асимптотически

однозначно блужданием в CTRW-модели на евклидовой решетке с постоянным шагом и подходящей функцией задержки (вывод 4.4) и показана корректность такого моделирования. Вывод 4.4 позволяет имитировать процесс субдиффузии на множестве дробной размерности с ненулевой связностью, избегая прямого стохастического моделирования блуждания на множестве дробной сеточной размерности.

В качестве приложения построенной модели рассмотрены две следующие задачи.

В п.4.2 показано, как на основе построенной в п.4.1 имитационной модели субдиффузии определяется во времени ширина диффузионного пакета в зависимости от связности порового пространства.

В п.4.3 на основе CTRW-модели перколяционного процесса в поровом пространстве F заданной сеточной размерности определены значения показателя аномальности и параметра связности на пороге протекания; получена оценка сеточной размерности порового пространства, на котором имеет место перколяционный процесс с заданным показателем аномальности; получены оценки показателя аномальности для процесса протекания и величины связности порового пространства.

В п. 4.4 приводится описание модели аномальной диффузии, которая в ряде работ, [20,84], рекомендовалась для моделирования фрактального броуновского движения (ФБД). Показано, что эта модель дает стационарный случайный процесс, который не обладает фундаментальными свойствами ФБД.

В заключении приводятся основные результаты проделанной работы.

В приложении 1 установлено, что уравнение субдиффузии в CTRW модели может быть сведено к начальной задаче для дифференциального уравнения с дробной производной по времени при определенных условиях, и разработаны новые численные методы решения этой задачи. Эти методы основаны не на аппроксимации оператора дробной производной по времени, а на сходимости последовательности реализаций субдиффузии на евклидо-

вых решетках при измельчении шага решетки. Установлено, что уравнения с дробной производной по времени описывают процесс субдиффузии тогда и только тогда, когда правая часть уравнения зависит от начальных данных определенным образом.

В п. П.1.1 выводится необходимое и достаточное условие, при котором *интегральное* уравнение, описывающее субдиффузию в R^1 - R^3 , эквивалентно начальной задаче для дифференциального уравнения с дробной производной по времени (теорема П.1.7). Это позволяет нам выделить среди множества формальных начально-краевых задач для уравнения в дробной производной по t те, которые имеют физический смысл в рамках CTRW модели.

Из полученного необходимого и достаточного условия следует, что процесс субдиффузии, связанный с задержками частиц, обязательно приводит к появлению правой части специального вида в дифференциальном уравнении (замечание П.1.10). Поэтому дифференциальные уравнения с дробной производной по времени с произвольной правой частью, а также уравнения без правой части не являются реализациями процесса аномальной диффузии, как ошибочно утверждается в ряде работ, [25,75] и др.

В п. П.1.2 приводятся примеры CTRW-моделей, [73], [78], которые описываются дифференциальными уравнениями параболического типа.

В п. П.1.3 установлены условия, при которых решение *интегро-разностного* уравнения субдиффузии в модели (В) *аппроксимирует* решение начальной задачи для дифференциального уравнения с дробной производной по времени (теорема П.1.12). Теорема П.1.13 устанавливает, что разработанные в главе I численные методы решения интегро-разностного уравнения субдиффузии могут быть использованы для численной аппроксимации решения начальных задач для дифференциальных уравнений субдиффузии.

В п. П.1.4 описано применение метода прямого стохастического моделирования субдиффузии, разработанного в п.2.4, к решению задач для дифференциальных уравнений субдиффузионного типа (теорема П.1.15).

ГЛАВА 1. CTRW-МОДЕЛИ СУБДИФФУЗИИ НА ЕВКЛИДОВЫХ РЕШЕТКАХ

Целью данной главы является построение такой математической модели субдиффузии, которая позволит по двум характеристикам – коэффициенту диффузии и показателю аномальности диффузионного процесса – определить распределение концентрации при больших значениях времени. В дальнейшем, в главе 4, будет установлена связь показателя аномальности субдиффузии с параметром связности порового пространства.

На основе известной CTRW-модели, [72], [78], в этой главе строится модель (В) субдиффузии на евклидовых решетках в R^n , $n=1,2,3$, и выводится ее интегроразностное уравнение. Для модели (В) субдиффузии получен класс $\mathcal{P}$ функций плотности вероятности задержки, в котором доказано свойство асимптотической единственности концентрации (утверждение 1.25). Необходимые и достаточные условия принадлежности классу $\mathcal{P}$ установлены в теореме 1.24. Исследован процесс субдиффузии с источниками и стоками и для него получено представление среднего квадрата перемещения в зависимости от времени, теорема 1.28.

Построена стохастическая модель субдиффузии (В), доказана сходимость стохастических реализаций к решению интегрального уравнения субдиффузии (теорема 1.35) и выведена оценка требуемого для моделирования количества частиц при заданной погрешности отклонения стохастической реализации от решения интегроразностного уравнения субдиффузии (леммы 1.36, 1.37).

Результаты этой главы используются далее для численного моделирования субдиффузии на евклидовых решетках в R^n и прямого стохастического моделирования (глава 2); для разработки комплекса программ для моделирования субдиффузии (глава 3); для моделирования субдиффузионных процессов в средах поровым пространством дробной размерности с ненулевой

связностью (глава 4); а также для построения дифференциальной модели субдиффузии (приложение 1).

1.1. Вспомогательные сведения о пространстве обобщенных функций медленного роста

Уравнения субдиффузии будут выведены и исследованы на классе обобщенных функций медленного роста. Приведем, следуя [5], необходимые нам основные свойства функций этого класса.

Определение 1.1, [5]. Множество *основных функций* $D=D(R^n)$ – все финитные бесконечно дифференцируемые в R^n функции.

Сходимость на множестве D определяется следующим образом.

Определение 1.2, [5]. Последовательность $\{\varphi_k\}$ функций из D *сходится* к функции $\varphi \in D$, $\varphi_k \rightarrow \varphi$, если

1) $\exists$ число $R>0$ такое, что $\forall k \text{ supp } \varphi_k \in U_R$, где U_R – шар радиуса R .

2) $\forall \alpha=(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n): D^\alpha \varphi_k(x) \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{x \in R^n} D^\alpha \varphi(x)$ равномерно.

Множество D с определенной на нем сходимостью образует линейное пространство. Операции дифференцирования, неособенной линейной замены переменных, умножение на функцию $a(x) \in C^\infty(R^n)$, непрерывны из D в D , [5].

Определение 1.3, [5]. *Обобщенной функцией* называется всякий линейный непрерывный функционал на пространстве основных функций D . Множество всех обобщенных функций обозначим $D' = D'(R^n)$.

Значение функционала f на функции φ запишем как (f, φ) .

Определение 1.4, [5]. Сходимость в D' определяется как *слабая* сходимость функционалов: последовательность $\{f_k\}$ обобщенных функций из D' *сходится* к обобщенной функции $f \in D'$, $f_k \rightarrow f$, если $\forall \varphi \in D$: $(f_k, \varphi) \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} (f, \varphi)$.

Линейное множество D' с введенной на нем сходимостью называется *пространством обобщенных функций* D' . Пространство D' является полным.

Определение 1.5, [5]. *Регулярные* обобщенные функции – функционалы, определяемые локально интегрируемыми в R^n функциями f :

$$(f, \varphi) = \int_{R^n} f(x) \varphi(x) dx,$$

остальные обобщенные функции называются *сингулярными*. Например, δ -функция Дирака – сингулярная обобщенная функция,

$$(\delta, \varphi) = \int_{R^n} \delta(x) \varphi(x) dx = \varphi(0), \quad \forall \varphi \in D(R^n).$$

Существует взаимно однозначное соответствие между локально интегрируемыми в R^n функциями и регулярными обобщенными функциями.

Обозначим D'_+ – совокупность обобщенных функций из $D'(R^1)$, обращающихся в нуль при $t < 0$.

Утверждение 1.6, [5]. Пусть $f, g \in D'_+$. Тогда свертка $f * g$ принадлежит D'_+ и представляется в виде

$$(f * g, \varphi) = (f(t)g(\tau), \eta_1(t)\eta_2(\tau)\varphi(t+\tau)), \quad \forall \varphi \in D(R^1),$$

где η_1 и η_2 – любые функции класса $C^\infty(R^1)$, равные 1 в окрестности $[0, \infty)$ и 0 при больших отрицательных t .

Определение 1.7, [5]. Множеством *основных функций* $S = S(R^n)$ назовем все функции класса $C^\infty(R^n)$, убывающие при $|x| \rightarrow \infty$ вместе со своими производными быстрее любой степени $\frac{1}{|x|}$.

Сходимость на множестве S определяется следующим образом.

Определение 1.8, [5]. Последовательность $\{\varphi_k\}$ функций из S сходится к функции $\varphi \in S$, $\varphi_k \rightarrow \varphi$, если $\forall \alpha, \beta: x^\beta D^\alpha \varphi_k(x) \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{x \in R^n} x^\beta D^\alpha \varphi(x)$ равномерно.

Множество S с определенной на нем сходимостью образует линейное пространство, причем $D \subset S$.

Обозначим θ_M – множество функций $a(x)$ таких, что $D^\beta a(x) \leq C_\beta (1 + |x|)^{m_\beta}$ для некоторых чисел β, C_β, m_β , т.е. $a(x)$ растет на бесконечности не быстрее некоторого полинома.

Операции дифференцирования, неособенной линейной замены переменных, умножение на функцию $a(x) \in \theta_M$ непрерывны из S в S , [5].

Определение 1.9, [5]. *Обобщенной функцией медленного роста* называется всякий линейный непрерывный функционал на пространстве основных функций S . Множество всех обобщенных функций медленного роста обозначим $S' = S'(R^n)$, $S' \subset D'$.

Определение 1.10, [5]. Сходимость в S' определяется как *слабая сходимость* функционалов: последовательность $\{f_k\}$ обобщенных функций из S' *сходится* к обобщенной функции $f \in S'$, $f_k \rightarrow f$, если $\forall \varphi \in S$: $(f_k, \varphi) \xrightarrow{k \rightarrow \infty} (f, \varphi)$.

Линейное множество S' с введенной на нем сходимостью называется *пространством обобщенных функций медленного роста* S' .

Обозначим $S'_+ = D'_+ \cap S'$, и $D'_+(a)$ – совокупность обобщенных функций из $D'(R^1)$ таких, что $f(t)e^{-\sigma t} \in S'_+ \quad \forall \sigma > a$. При $a_1 < a_2$ справедливо: $D'_+(a_1) \subset D'_+(a_2)$, $S'_+ \subset D'_+(0)$, [5].

Определение 1.11, [5]. Пусть $f(x) \in S'(R^n)$ и $g(y) \in S'(R^m)$. Тогда прямое произведение $f(x) \cdot g(y) \in S'(R^{n+m})$ определяется как

$$(f(x) \cdot g(y), \varphi(x, y)) = (f(x), (g(y), \varphi(x, y))) \quad \forall \varphi(x, y) \in S.$$

Прямое произведение коммутативно и ассоциативно в S' , линейно и непрерывно относительно $f : S'(R^n) \rightarrow S'(R^{n+m})$ и относительно $g : S'(R^m) \rightarrow S'(R^{n+m})$.

Утверждение 1.12, [5]. Пусть $f \in S'$, и g – финитная обобщенная функция. Тогда свертка $f * g$ принадлежит S' и представляется в виде

$$(f * g, \varphi) = (f(x) \cdot g(y), \eta(y) \varphi(x + y)), \quad \forall \varphi \in S(R^n),$$

где η – любая функция из D , равная 1 в окрестности носителя g .

Утверждение 1.13, [5]. Пусть $f, g \in S'_+$. Тогда свертка $f * g$ принадлежит S'_+ и представляется в виде

$$(f * g, \varphi) = (f(t) \cdot g(\tau), \eta_1(t) \eta_2(\tau) \varphi(t + \tau)), \quad \forall \varphi \in S(R^1),$$

где η_1 и η_2 – любые функции класса C^∞ , равные 1 в окрестности $[0, \infty)$ и 0 при больших отрицательных t .

Поскольку основные функции из S абсолютно интегрируемы, то на них определена операция преобразования Фурье F :

$$F[\varphi](\xi) = \widehat{\varphi}(\xi) = \int_{R^n} \varphi(x) e^{ix\xi} dx, \quad \forall \varphi \in S(R^n).$$

Более того, $F: S \rightarrow S$ непрерывно и взаимно однозначно, [5].

Определение 1.14, [5]. Преобразование Фурье F обобщенной функции медленного роста f определяется как

$$(F[f], \varphi) = (\widehat{f}, \varphi) = (f, F[\varphi]), \quad \forall \varphi \in S(R^n), f \in S'(R^n).$$

Определение 1.15, [5]. Обратное преобразование Фурье F^{-1} обобщенной функции медленного роста f определяется как

$$F^{-1}[f] = \frac{1}{(2\pi)^n} F[f(-x)], \quad \forall f \in S'(R^n).$$

Утверждение 1.16, [5]. Преобразования Фурье F и F^{-1} преобразуют S' на S' взаимно однозначно и взаимно непрерывно.

Утверждение 1.17, [5].

1) Пусть $f(x) \in S'(R^n)$. Дифференцирование преобразования Фурье F :

$$D^\alpha F[f] = F[(ix)^\alpha f].$$

2) Пусть $f(x,y) \in S'(R^{m+n})$. Дифференцирование преобразования Фурье F_x :

$$D_x^\alpha D_y^\beta F_x[f] = F_x[(ix)^\alpha D_y^\beta f].$$

3) Пусть $f \in S'(R^n)$. Преобразование Фурье F производной есть

$$F[D^\alpha f] = (-i\xi)^\alpha F[f].$$

4) Пусть $f(x,y) \in S'(R^{m+n})$. Тогда преобразование Фурье F_x производной есть

$$F_x[D_x^\alpha D_y^\beta f] = (-i\xi)^\alpha D_y^\beta F_x[f].$$

5) Пусть $f \in S'$, и g – финитная обобщенная функция. Тогда

$$F[f * g] = F[f] \cdot F[g].$$

Определение 1.18, [5]. Пусть $f(t)$ – локально интегрируемая функция в R^1 такая, что $|f(t)| \leq Ae^{at}$ при $t \rightarrow \infty$ для некоторых констант A и a . Преобразование Лапласа функции $f(t)$ определяется как

$$\tilde{f}(s) = \int_0^\infty f(t)e^{-st} dt, \quad s = \sigma + i\omega.$$

Определение 1.19, [5]. Преобразование Лапласа $L[f](s)$ обобщенной функции $f(t) \in D'_+(a)$ определяется при $\sigma > a$ как

$$L[f](s) = \tilde{f}(s) = F[f(t)e^{-\sigma t}](-i\omega) = 2\pi F^{-1}[f(t)e^{-\sigma t}], \quad s = \sigma + i\omega. \quad (1.1)$$

При этом L действует из $D'_+(a)$ в S'_+ .

Между множествами функций $f(t)$ и $\tilde{f}(s)$ существует взаимно однозначное соответствие.

Утверждение 1.20, [5]

1) Пусть $f \in D'_+(a)$. Преобразование Лапласа производной есть

$$L[D^\alpha f] = s^\alpha L[f], \quad \sigma > a.$$

2) Пусть $f, g \in D'_+(a)$. Тогда преобразование Лапласа свертки:

$$L[f * g] = L[f] \cdot L[g], \quad \sigma > a.$$

1.2. Общее интегральное уравнение CTRW-модели

В этом параграфе структура известной CTRW-модели, [73,78], формируется нами в виде системы аксиом (А). Излагается вывод интегрального уравнения динамики концентрации для диффузионного процесса и доказывается теорема единственности его решения в классе непрерывных функций.

CTRW-модель, она же *модель непрерывного по времени случайного блуждания*, описывает диффузионные процессы посредством случайного блуждания частиц при условии, что частицы либо перемещаются, либо задерживаются на некоторое случайное время. Эти задержки и перемещения задаются функциями плотности вероятности. Под «частицей» понимается материальная точка с заданными координатами. В CTRW-модели задание начального распределения частиц и функций плотности вероятности задержки и перемещения позволяет однозначно определить плотность вероятности $p(\bar{x}, t)$ для частицы находиться в момент t в точке $\bar{x}$.

Сформируем структуру CTRW-модели в виде следующей **системы аксиом (А)**:

- 1) В каждый момент времени частицы распределены на некотором подмножестве евклидова пространства R^n ($n=1,2,3$). Распределение задается функцией концентрации $p(\bar{x}, t)$, $\bar{x} = (x_1, \dots, x_n) \in R^n$, $t \geq 0$. $p(\bar{x}, t)$ – количество частиц, заключенных в элементе объема множества в заданной точке $(x_1, \dots, x_n)$ в момент времени t , отнесенное к общему количеству частиц.
- 2) Каждая частица задерживается в элементе объема на некоторое случайное время t (попадает в ловушку), после чего совершает мгновенное перемещение (делает скачок) в пространстве R^n на некоторый случайный вектор $\bar{x}' \in R^n$. Заданы:
 - плотность вероятности $\lambda(\bar{x}')$ случайной величины $\bar{x}'$;
 - плотность вероятности $f(t)$ случайной величины t .

Заметим, что нормированная концентрация $p(\bar{x}, t)$, т.е. количество частиц, заключенных в элементе объема множества в заданной точке $\bar{x}$ в момент времени t , отнесенное к общему количеству частиц, есть *плотность вероятности находиться в точке $\bar{x}$ в момент времени t* .

Мы будем рассматривать модели, в которых перемещение частиц в евклидовом пространстве R^n на вектор $\bar{x}'$ за время t задается плотностью вероятности $\psi(\bar{x}', t) = \lambda(\bar{x}')f(t)$, где функции $\lambda(\bar{x}')$ и $f(t)$ не зависят от точки $\bar{x}$ пространства R^n .

Выведем в CTRW-модели уравнение для плотности вероятности $p(\bar{x}, t)$ находиться в точке $\bar{x}$ в момент времени t , исходя из системы аксиом (A).

Очевидно, в точке $\bar{x} \in R^n$ находятся в момент времени t те частицы, последний шаг которых привел их в эту точку (либо они находились в этой точке с начала процесса). По аксиоме 2, последний шаг величины $\bar{x}'$ был совершен с плотностью вероятности $\lambda(\bar{x}')$, после некоторой задержки t с плотностью вероятности $f(t)$. Тогда для каждой частицы плотность вероятности $n(\bar{x}, t)$ *прибыть* в точку $\bar{x}$ в момент времени t определяется по формуле полной вероятности, [78]:

$$n(\bar{x}, t) = \int_{R^n} \lambda(\bar{x}') d\bar{x}' \int_0^t n(\bar{x} - \bar{x}', t - t') f(t') dt' + n_0(\bar{x}) \delta(t), \quad (1.1)$$

где $\delta(t)$ – дельта функция, $n_0(\bar{x}) = n(\bar{x}, 0)$ – начальное распределение плотности вероятности $n(\bar{x}, t)$. Первое слагаемое в (1.1) есть плотность вероятности для частиц прибыть в точку $\bar{x}$ из всевозможных точек $\bar{x} - \bar{x}'$, совершив перемещение $\bar{x}'$, после задержки в точке $\bar{x} - \bar{x}'$ на всевозможные времена t' (не больше t), для $t > 0$. Второе слагаемое в (1.1) есть плотность вероятности для частиц находиться в точке $\bar{x}$ в момент времени $t=0$. Представление (1.1) есть распределение с регулярной и сингулярной частями.

Тогда плотность вероятности $p(\bar{x}, t)$ *находиться* в момент t в точке $\bar{x} \in R^n$, т.е. плотность вероятности для частицы прибыть в точку $\bar{x}$ и до

момента t задержаться в ней, определяется представлением

$$p(\bar{x}, t) = \int_0^t n(\bar{x}, t - \tau) F(\tau) d\tau, \quad (1.2)$$

где

$$F(t) = 1 - \int_0^t f(\tau) d\tau \quad (1.3)$$

есть вероятность задержки не менее чем на t . При этом плотность вероятности $p_0(\bar{x})$ находиться в точке $\bar{x}$ в момент времени $t=0$ равна, очевидно, плотности вероятности $n_0(\bar{x})$. Подставляя (1.1) в (1.2), получим

$$p(\bar{x}, t) = \int_0^t d\tau \int_{R^n} \lambda(\bar{x}') d\bar{x}' \int_0^{t-\tau} n(\bar{x} - \bar{x}', t - \tau - t') f(t') F(\tau) dt' + p_0(\bar{x}) F(t)$$

Переставляя интегралы по t' и τ , что допустимо в классе рассматриваемых функций, получаем

$$p(\bar{x}, t) = \int_0^t f(t') dt' \int_{R^n} \lambda(\bar{x}') d\bar{x}' \int_0^{t-t'} n(\bar{x} - \bar{x}', t - t' - \tau) F(\tau) d\tau + p_0(\bar{x}) F(t) \quad (1.4)$$

преобразуя внутренний интеграл с учетом (1.2), получаем из (1.4) уравнение относительно функции $p(\bar{x}, t)$:

$$p(\bar{x}, t) = \int_0^t f(t') dt' \int_{R^n} \lambda(\bar{x}') p(\bar{x} - \bar{x}', t - t') d\bar{x}' + p_0(\bar{x}) F(t) \quad (1.5)$$

Это есть *общее интегральное уравнение CTRW-модели диффузии*. Различные физические модели субдиффузии, супердиффузии, обычной (гауссовской) диффузии получаются из этого уравнения конкретным заданием функций $f(t)$ и $\lambda(\bar{x})$, [59,73,78] и др.

Теорема 1.21. Общее интегральное уравнение CTRW-модели имеет единственное решение в классе непрерывных по t функций.

Доказательство. Определим норму $\|p(\bar{x}, t)\|_C = \max_{\substack{\tau \in (0, t) \\ \bar{x} \in R^n}} |p(\bar{x}, \tau)|$.

Обозначим через L оператор, представляющий правую часть уравнения (1.5), и покажем, что оператор L сжимающий. Пусть $p_1(\bar{x}, t)$ и $p_2(\bar{x}, t)$ – произвольные непрерывные функции. Тогда

$$\begin{aligned} & \|Lp_1(\bar{x}, t) - Lp_2(\bar{x}, t)\|_C = \\ & = \left\| \int_0^t f(t') dt' \int_{R^n} \lambda(\bar{x}') (p_1(\bar{x} - \bar{x}', t - t') - p_2(\bar{x} - \bar{x}', t - t')) d\bar{x}' \right\| \leq \\ & \leq \|p_1(\bar{x}, t) - p_2(\bar{x}, t)\|_C \int_0^t f(\tau) d\tau \int_{R^n} \lambda(\bar{x}') d\bar{x}'. \end{aligned}$$

Так как $f(t)$ и $\lambda(\bar{x})$ – функции плотности вероятности, то $\int_{R^n} \lambda(\bar{x}') d\bar{x}' = 1$

и $\int_0^t f(\tau) d\tau < \int_0^\infty f(\tau) d\tau = 1$, и тогда существует функция $\mu(t) < 1$ такая, что

$$\|Lp_1 - Lp_2\|_C \leq \|p_1 - p_2\|_C \mu(t).$$

Следовательно, оператор L сжимающий и по принципу сжатых отображений уравнение (1.5) имеет единственное решение. Теорема 1.21 доказана.

Представление решения уравнения (1.5) получается применением преобразования Фурье по пространственной переменной и преобразования Лапласа по временной переменной, [8,78], которые, как известно, переводят свертку функций в произведение их образов. Обозначим образ функции $p(\bar{x}, t)$ при преобразовании Фурье по $\bar{x}$ через $\hat{p}(\bar{u}, t)$, образ функции $p(\bar{x}, t)$ при преобразовании Лапласа по t через $\tilde{p}(\bar{x}, s)$, тогда преобразование Фурье и Лапласа от (1.5) дает

$$\hat{\tilde{p}}(\bar{u}, s) = \tilde{f}(s) \cdot \hat{\lambda}(\bar{u}) \cdot \tilde{p}(\bar{u}, s) + \hat{p}_0(\bar{u}) \cdot \tilde{F}(s),$$

откуда получаем

$$\hat{\tilde{p}}(\bar{u}, s) = \frac{\tilde{F}(s)}{1 - \tilde{f}(s) \cdot \hat{\lambda}(\bar{u})} \cdot \hat{p}_0(\bar{u}). \quad (1.6)$$

Нахождение функции $p(\bar{x}, t)$ теперь сводится к обратному преобразованию Фурье и Лапласа.

Известные в настоящий момент методы определения $p(\bar{x}, t)$, [78], заключаются в следующем:

- 1) Прямое определение обратного преобразования Фурье и Лапласа от функции $\hat{p}(\bar{u}, s)$, (1.6). Этот способ, как правило, аналитически нереализуем.
- 2) Для некоторых видов функций $\lambda(\bar{x})$ и $f(t)$ уравнение (1.5) редуцируется к дифференциальному уравнению с дробными производными по времени и/или по пространству, которое решается в R^1 при помощи преобразования Меллина и дает выражение для функции $p(x, t)$ через функции Фокса. Эти вычисления можно найти, например, в [78], [95]. Подобные представления для решения уравнения (1.5) в R^2 и R^3 нам неизвестны.
- 3) Функция $\hat{p}(\bar{u}, s)$ раскладывается в ряд по степеням $\bar{u}$, s и почленно совершается обратное преобразование Фурье и Лапласа. Результат представляет собой степенной ряд, который можно преобразовать к ряду, представляющему ту же функцию Фокса, [63].
- 4) Определяется асимптотическое поведение функции $\hat{p}(\bar{u}, s)$ при малых s и по теореме Таубера восстанавливается асимптотика $p(\bar{x}, t)$ при больших t . В одномерном случае это сделано в [96], [97], а в трехмерном симметрическом случае – в [82].

Все указанные способы восстановления функции $p(\bar{x}, t)$ в R^1 дают в результате некоторый медленно сходящийся ряд, [50, 78], а в R^2 и R^3 позволяют определить лишь асимптотическое поведение функции $p(\bar{x}, t)$.

В силу вышеперечисленных трудностей мы приходим к необходимости поиска и исследования альтернативных методов численного решения интегрального уравнения (1.5). Займемся частным случаем этого уравнения, когда специальное задание функций $\lambda(\bar{x})$ и $f(t)$ определяет процесс субдиффузии.

1.3. Построение и исследование CTRW-модели (В) субдиффузии на евклидовой решетке

В данном параграфе строится CTRW-модель субдиффузии на евклидовой решетке, для нее выводится интегроразностное уравнение динамики концентрации частиц. Получено необходимое и достаточное условие, определяющее класс $\mathcal{P}$ функций плотности вероятности задержки для этой модели, теорема 1.24. Доказано утверждение 1.25 об асимптотической эквивалентности концентраций, отвечающих заданному начальному условию и любой функции задержки из класса $\mathcal{P}$.

Классификация диффузионных процессов связана с поведением среднего квадрата перемещения блуждающих частиц

$$\langle r^2(t) \rangle = \langle \sum_{i=1}^n x_i^2 \rangle ,$$

где x_i – перемещения вдоль координатных осей в R^n , $n=1,2,3$, а $\langle \dots \rangle$ обозначает усреднение по ансамблю частиц.

Если для некоторого τ_0 выполняется соотношение

$$\lim_{t \gg \tau_0} \langle r^2(t) \rangle = D_\alpha t^\alpha \quad (1.7)$$

то при $\alpha \neq 1$ говорят об аномальной диффузии. Случай $\alpha \in (0,1)$ носит общепринятое название *субдиффузии*. Этот случай получается из общей CTRW-модели специальным заданием функций $\lambda(\bar{x})$ и $f(t)$ в уравнении (1.5).

Определим условия, которым должны подчиняться функции $\lambda(\bar{x})$ и $f(t)$, определяющие процесс субдиффузии на евклидовой решетке. Для этого нам понадобится следующее утверждение.

Утверждение 1.22. Обозначим Фурье-образ функции $p(\bar{x}, t)$, $\bar{x} = (x_1, \dots, x_n)$, через $\hat{p}(\bar{u}, t)$, $\bar{u} = (u_1, \dots, u_n)$. Тогда если для $p(\bar{x}, t)$ существует интеграл $\int_{R^n} (x_1^2 + \dots + x_n^2) p(\bar{x}, t) d\bar{x}$, то выполняется:

$$\int_{R^n} (x_1^2 + \dots + x_n^2) p(\bar{x}, t) d\bar{x} = - \left(\frac{\partial^2}{\partial u_1^2} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial u_n^2} \right) \hat{p}(\bar{u}, t) \Big|_{\bar{u}=\bar{0}} \quad (1.8)$$

Доказательство.

По определению преобразования Фурье,

$$\begin{aligned} - \left(\frac{\partial^2}{\partial u_1^2} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial u_n^2} \right) \hat{p}(\bar{u}, t) &= - \left(\frac{\partial^2}{\partial u_1^2} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial u_n^2} \right) \int_{R^n} p(\bar{x}, t) e^{i\bar{u}\bar{x}} d\bar{x} = \\ &= - \int_{R^n} p(\bar{x}, t) \left(\frac{\partial^2}{\partial u_1^2} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial u_n^2} \right) (e^{i\bar{u}\bar{x}}) d\bar{x} = \int_{R^n} p(\bar{x}, t) (x_1^2 + \dots + x_n^2) e^{i\bar{u}\bar{x}} d\bar{x}, \end{aligned}$$

и при подстановке $\bar{u} = \bar{0}$ получаем (1.8).

Утверждение 1.22 доказано.

Лемма 1.23. Средний квадрат перемещения в CTRW-модели (A) определяется по формуле

$$\begin{aligned} \langle r^2(t) \rangle &= -L^{-1} \left(n \frac{(1 - \tilde{f}(s))}{s} \tilde{f}(s) \cdot \right. \\ &\quad \left. \cdot \sum_{i=1}^n \frac{\hat{\lambda}_{u_i u_i}''(\bar{u}) (1 - \tilde{f}(s) \hat{\lambda}(\bar{u})) + 2 \tilde{f}(s) (\hat{\lambda}_{u_i}'(\bar{u}))^2}{(1 - \tilde{f}(s) \hat{\lambda}(\bar{u}))^3} \Big|_{\bar{u}=\bar{0}} \right), \end{aligned} \quad (1.9)$$

где L^{-1} – оператор обратного преобразования Лапласа.

Доказательство.

Пусть $\bar{x} = (x_1, \dots, x_n) \in R^n$. Выберем $p_0(\bar{x}) = \delta(\bar{x})$. Тогда функцию $p(\bar{x}, t)$ можно рассматривать не только как плотность вероятности находиться в точке $\bar{x}$ в момент времени t , но и как плотность вероятности отклониться от начального положения на вектор $\bar{x}$. Тогда средний квадрат перемещения задается формулой

$$\langle r^2(t) \rangle = \langle \sum_{i=1}^n x_i^2(t) \rangle = \int_{R^n} \sum_{i=1}^n x_i^2 p(\bar{x}, t) d\bar{x}. \quad (1.10)$$

Функция $p(\bar{x}, t)$ задана интегральным уравнением (1.5), поэтому

напрямую подставить ее в (1.10) нельзя. Используя (1.8), запишем:

$$\begin{aligned} \langle r^2(t) \rangle &= \int_{R^n} \sum_{i=1}^n x_i^2 p(\bar{x}, t) d\bar{x} = - \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2}{\partial u_i^2} \hat{p}(\bar{u}, t) \Big|_{\bar{u}=0} = \\ &= -L^{-1} \left(\sum_{i=1}^n \frac{\partial^2}{\partial u_i^2} \tilde{p}(\bar{u}, s) \Big|_{\bar{u}=0} \right), \end{aligned} \quad (1.11)$$

где L^{-1} обозначает обратное преобразование Лапласа, $\bar{u} = (u_1, \dots, u_n) \in \mathbb{C}^n$.

Так как из формулы (1.3) следует, что

$$\tilde{F}(s) = \frac{1}{s} (1 - \tilde{f}(s)), \quad (1.12)$$

то из (1.6) получаем:

$$\tilde{p}(\bar{u}, s) = \frac{1 - \tilde{f}(s)}{s} \cdot \frac{1}{1 - \tilde{f}(s) \cdot \hat{\lambda}(\bar{u})}$$

Тогда вторая производная функции $\tilde{p}(\bar{u}, s)$ по u_i имеет вид:

$$\frac{\partial^2 \tilde{p}(\bar{u}, s)}{\partial u_i^2} = \tilde{f}(s) \frac{(1 - \tilde{f}(s))}{s} \cdot \frac{\hat{\lambda}_{u_i u_i}''(\bar{u}) (1 - \tilde{f}(s) \hat{\lambda}(\bar{u})) + 2 \tilde{f}(s) (\hat{\lambda}_{u_i u_i}''(\bar{u}))^2}{(1 - \tilde{f}(s) \hat{\lambda}(\bar{u}))^3} \Big|_{\bar{u}=0} \quad (1.13)$$

и, подставляя (1.13) в (1.11), получаем (1.9).

Лемма 1.23 доказана.

Из этой леммы следует, что функции $f(t)$ и $\lambda(\bar{x})$, определяющие процесс субдиффузии, должны быть таковы, чтобы при подстановке их в формулу (1.9) получалась зависимость (1.7) при $\alpha \in (0, 1)$.

Рассмотрим моделирование непрерывного по времени процесса субдиффузии, в котором частицы перемещаются по узлам равномерной решетки в евклидовом пространстве следующим образом. Пусть частица мгновенно перемещается равновероятно в один из соседних узлов решетки, причем в каждом узле она задерживается на случайное время, определенное функцией плотности вероятности $f(t)$.

На основе аксиом CTRW-модели п.1.1, такая модель субдиффузии на евклидовой решетке задается следующей **системой аксиом (В)**:

- 1) В каждый момент времени частицы находятся в узлах $\bar{x}_j \in R^n$ ($n=1,2,3$), $j \in Z$, равномерной решетки с шагом h в R^n . Распределение частиц по узлам $\bar{x}_j$ задается функцией концентрации $p(\bar{x}_j, t)$, $p(\bar{x}_j, t)$ – количество частиц, заключенных в элементе объема множества в заданной точке $\bar{x}_j$ в момент времени t , отнесенное к общему количеству частиц.
- 2) Каждая частица задерживается в данном узле на некоторое случайное время t , после чего совершает мгновенное перемещение равновероятно в один из соседних узлов решетки. Заданы:
– плотность вероятности $\lambda(\bar{x}')$ перемещения:

$$\lambda(\bar{x}') = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n (\delta(\bar{x}' - \bar{e}_i h) + \delta(\bar{x}' + \bar{e}_i h)), \quad (1.14)$$

где векторы $\bar{e}_i$ – координатные орты. Распределение (1.14) определяет возможность переместиться только в один из соседних узлов решетки.

– плотность вероятности $f(t)$ случайной величины t такая, что выполняется условие (1.7) при $\alpha \in (0,1)$.

В данной модели каждый узел схематически представляет собой кубическую ячейку в пространстве с центром в данном узле, сторона ячейки равна h , рис.1.1 (ячейки обозначены пунктиром). Задержка частицы в узле есть блуждание частицы внутри этой ячейки, и функция $f(t)$ реализует задержку, вызванную этим блужданием.

С учетом (1.14), получим уравнение диффузии на решетке в CTRW-модели (В) из общего уравнения (1.5) диффузии в CTRW-модели:

$$p(\bar{x}, t) = \frac{1}{2n} \int_0^t f(t') dt' \int_{R^n} p(\bar{x} - \bar{x}', t - t') \sum_{i=1}^n (\delta(\bar{x} - \bar{e}_i h) + \delta(\bar{x} + \bar{e}_i h)) d\bar{x}' + p_0(\bar{x}) F(t)$$

и окончательно:

$$p(\bar{x}, t) = \frac{1}{2^n} \int_0^t \sum_{i=1}^n (p(\bar{x} - \bar{e}_i h, t - t') + p(\bar{x} + \bar{e}_i h, t - t')) f(t') dt' + p_0(\bar{x}) F(t). \quad (1.15)$$

Теперь нам необходимо определить, каким условиям должна подчиняться функция $f(t)$ для того, чтобы для функции $p(\bar{x}, t)$ выполнялось условие (1.7) при $\alpha \in (0, 1)$. В частности, $f(t)$ должна зависеть от шага h в модели (В), так как чем больше ячейка, тем дольше будет блуждать в ней частица.

$$\tilde{f}(s) \sim \frac{1}{1 + \frac{h^2}{D_\alpha \Gamma(\alpha+1)} s^\alpha}, \quad (1.16)$$

причем в (1.7) имеет место равенство для всех t при наличии равенства в (1.16) для всех s .

Доказательство. Воспользуемся леммой 1.23. Для функции $\lambda(\bar{x})$, заданной в R^n формулой (1.14), определим ее образ Фурье $\hat{\lambda}(\bar{u})$ и производные $\hat{\lambda}'_{u_i}(\bar{u})$, $\hat{\lambda}''_{u_i u_i}(\bar{u})$ для подстановки в (1.9):

$$\hat{\lambda}(\bar{u}) = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n \left(e^{iu_i h} + e^{-iu_i h} \right) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \cos(u_i h), \quad (1.17)$$

$$\frac{\partial \hat{\lambda}(\bar{u})}{\partial u_i} = -\frac{h}{n} \sin(u_i h), \quad \frac{\partial^2 \hat{\lambda}(\bar{u})}{\partial u_i^2} = -\frac{h^2}{n} \cos(u_i h).$$

Подставляя полученные выражения в (1.9), получаем:

$$\langle r^2(t) \rangle = L^{-1} \left(\frac{h^2}{s} \cdot \frac{\tilde{f}(s)}{1 - \tilde{f}(s)} \right).$$

Теперь необходимо выбрать функцию $f(t)$ так, чтобы выполнялось условие

$$L^{-1} \left(\frac{h^2}{s} \cdot \frac{\tilde{f}(s)}{1 - \tilde{f}(s)} \right) \sim D_\alpha t^\alpha,$$

что по тауберовой теореме, [57], эквивалентно выполнению

$$\frac{h^2}{s} \cdot \frac{\tilde{f}(s)}{1 - \tilde{f}(s)} \sim \frac{D_\alpha \Gamma(\alpha + 1)}{s^{\alpha+1}}. \quad (1.18)$$

При этом для выполнения равенства в (1.7) должно иметь место равенство в (1.18). Следовательно,

$$\tilde{f}(s) \sim \frac{1}{1 + \frac{h^2}{D_\alpha \Gamma(\alpha + 1)} s^\alpha},$$

что и требовалось. Теорема 1.24 доказана.

Таким образом, уравнение (1.5) с функциями $f(t)$, (1.16), и $\lambda(\bar{x})$, (1.14), или, что то же самое, уравнение (1.15) с функцией $f(t)$, (1.16), описывают процесс субдиффузии со свойством (1.7) (со знаком равенства) при $\alpha \in (0, 1)$.

Отметим, что рассматриваемый нами процесс субдиффузии на евклидовой решетке не является гауссовским. Назовем *фундаментальным*

решением уравнения субдиффузии решение, соответствующее начальному распределению концентрации $p_0(\bar{x}) = \delta(\bar{x})$.

На рис.1.2.(а)-(в) приведены в сравнении графики фундаментального решения $p(x,t)$ уравнения субдиффузии (1.15) в R^1 и фундаментального решения $p_g(x,t)$ дифференциального уравнения диффузии

$$\frac{\partial p_g(x,t)}{\partial t} = \frac{D}{2} \frac{\partial^2 p_g(x,t)}{\partial x^2}$$

для разных значений t (графики $p_g(x,t)$ построены в Maple 10, аппроксимация функции $p(x,t)$ с погрешностью порядка $O(0.001)$ получена как численное решение задачи (2.2)). Гауссовский процесс, $p_g(x,t)$, показывает более быстрое выравнивание концентрации. Фундаментальное решение уравнения $p(x,t)$ субдиффузии имеет острую вершину в точке $x=0$ для всех значений α, t .

Полученное условие (1.16) на образ $\tilde{f}(s)$ функции $f(t)$ сложно использовать для практического моделирования субдиффузии. Действуя обратным преобразованием Лапласа, из (1.16) невозможно получить явное выражение для функции $f(t)$. Тем не менее, можно приблизительно представить $\tilde{f}(s)$ в виде некоторого ряда, представляющего какую-либо функцию и затем обратным преобразованием Лапласа получить $f(t)$.

Например, в работе [59] при исследовании субдиффузии в R^1 рассматривалась функция $f(t)$ вида

$$f(t) = \frac{\alpha}{(1+t)^{\alpha+1}}, \quad 0 < \alpha < 1,$$

легко показать, что ее образ Лапласа удовлетворяет (1.16) при $s \ll 1$.

В работе [78] для моделирования субдиффузии предлагалось (без совершения обратного преобразования Лапласа) использовать $\tilde{f}(s) \sim 1 - s^\alpha h^2$.

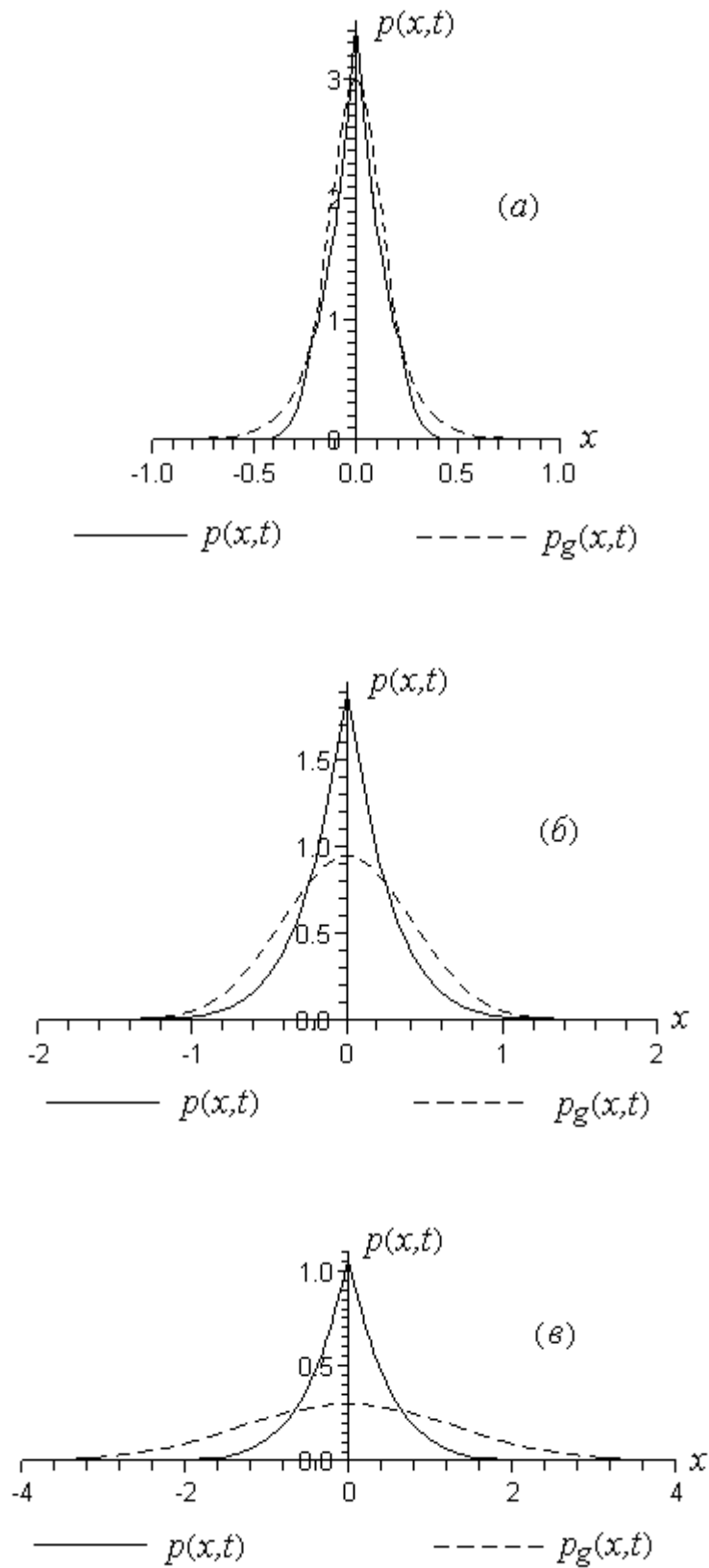


Рис.1.2. Сравнение графиков фундаментального решения $p(x,t)$ уравнения субдиффузии в R^1 , $\alpha=0.5$, $h=0.01$, и фундаментального решения $p_g(x,t)$ уравнения диффузии, $D=D_\alpha=1$, (a) $t=0.1$; (б) $t=1$; (в) $t=10$

При исследовании переноса заряда в аморфных материалах в [67], [81], [72], а также в [85] при моделировании негауссовского переноса в органических неупорядоченных твердых телах показано, что асимптотически при $t \gg 0$ $f(t) \sim \frac{1}{t^{\alpha+1}}$, α зависит от геометрических свойств материала.

Из теоремы 1.24 следует, что для моделирования субдиффузии со свойством (1.7) можно использовать любую функцию $f(t)$ с асимптотическим свойством (1.16). Согласно тауберовой теореме, [57], такая функция $f(t)$ удовлетворяет условию

$$f(t) \sim \frac{\alpha h^2}{D_\alpha \Gamma(1+\alpha) \Gamma(1-\alpha)} t^{-\alpha-1}, \quad t \gg 0.$$

Обозначим класс $\mathcal{P}$ – все функции $f(t)$, образ Лапласа $\tilde{f}(s)$ которых асимптотически по s при $s \ll 1$ удовлетворяет условию (1.16).

Тогда справедливо следующее утверждение.

Утверждение 1.25. Все функции концентрации $p(\bar{x}, t)$, полученные для заданной начальной концентрации $p(\bar{x}, 0) = p_0(\bar{x})$ в модели (В) при всевозможных функциях $f(t)$ из класса $\mathcal{P}$, эквивалентны при $t \gg 0$.

Доказательство.

Так как образы Лапласа $\tilde{f}(s)$ всех рассматриваемых функций $f(t)$ при $s \ll 1$ эквивалентны, то образы $\tilde{p}(\bar{u}, s)$ функций $p(\bar{x}, t)$, определяемые по формуле (1.6), также эквивалентны при $s \ll 1$. Следовательно, функции $p(\bar{x}, t)$ эквивалентны при $t \gg 0$.

Утверждение доказано.

Выберем из класса $\mathcal{P}$ конкретную функцию $f(t)$ для моделирования. Введем следующее представление для функции $f(t)$:

$$f(t) = \frac{\alpha A}{(A^{1/\alpha} + t)^{\alpha+1}}, \quad A = \frac{h^2}{D_\alpha \Gamma(1+\alpha) \Gamma(1-\alpha)} = \frac{h^2 \sin(\alpha\pi)}{D_\alpha \alpha\pi}, \quad 0 < \alpha < 1, \quad (1.19)$$

Тогда справедливо

Утверждение 1.26. Для функции $f(t)$, определяемой по формуле (1.19), средний квадрат перемещения в CTRW-модели субдиффузии (B) удовлетворяет условию (1.7) при $t \gg 0$.

Доказательство. Образ Лапласа $\tilde{f}(s)$ функции $f(t)$ имеет вид

$$\tilde{f}(s) = 1 - As^\alpha \Gamma(1-\alpha, A^{1/\alpha} s),$$

где $\Gamma(b, \Delta)$ – неполная гамма-функция, определяемая по формуле

$$\Gamma(b, \Delta) = \int_{\Delta}^{\infty} e^{-x} x^{b-1} dx,$$

и, так как для функции $\Gamma(b, \Delta)$ при $b \in (0, 1)$ имеет место оценка:

$$0 < \Gamma(b) - \Gamma(b, \Delta) < \frac{\Delta^b}{b},$$

то выполняется следующая оценка для $\tilde{f}(s)$:

$$1 - As^\alpha \Gamma(1-\alpha) < \tilde{f}(s) < 1 - As^\alpha \Gamma(1-\alpha) + \frac{A^{1/\alpha}}{1-\alpha} s, \quad (1.20)$$

тогда

$$\tilde{f}(s) \sim 1 - As^\alpha \Gamma(1-\alpha), \quad s \ll 1,$$

откуда при $s \rightarrow 0$ по теореме 1.24 следует искомое утверждение.

Утверждение 1.26 доказано.

В рассматриваемой нами модели (B) функция $f(t)$ зависит от размера ячейки: чем больше ячейка, тем дольше будет в ней блуждать, «задерживаться», частица. Приведенные на рис.1.3 графики функции $f(t)$ при $\alpha=0.5$ для разных значений шага сетки h иллюстрируют, что с ростом h действительно увеличивается плотность вероятности задержаться в ячейке на большее время.

На рис.1.4 приведен график зависимости среднего квадрата перемещения от времени $\langle r^2(t) \rangle_{\text{дискр}}$, полученный экспериментально для процесса субдиффузии на евклидовой решетке с функцией $f(t)$ вида (1.19), в сравнении

с графиком функции $\langle r^2(t) \rangle = D_\alpha t^\alpha$, погрешность моделирования имела порядок $O(0.01)$. По этим графикам видно, что выбранная функция $f(t)$ позволяет имитировать аномальную кинетику (1.7) достаточно хорошо при $t \gg 10$, т.е. в данной задаче $\tau_0 \approx 10$ в (1.7).

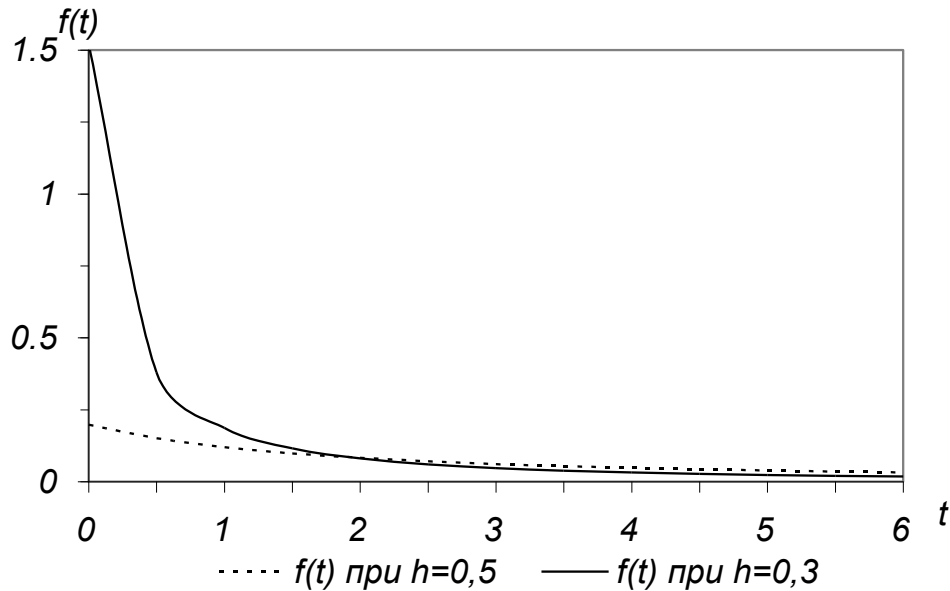


Рис.1.3. Графики функции плотности вероятности задержки $f(t)$ при $\alpha=0,5$ для шага сетки $h=0,5$ и $h=0,3$. С ростом h увеличивается плотность вероятности задержаться в ячейке на большее время

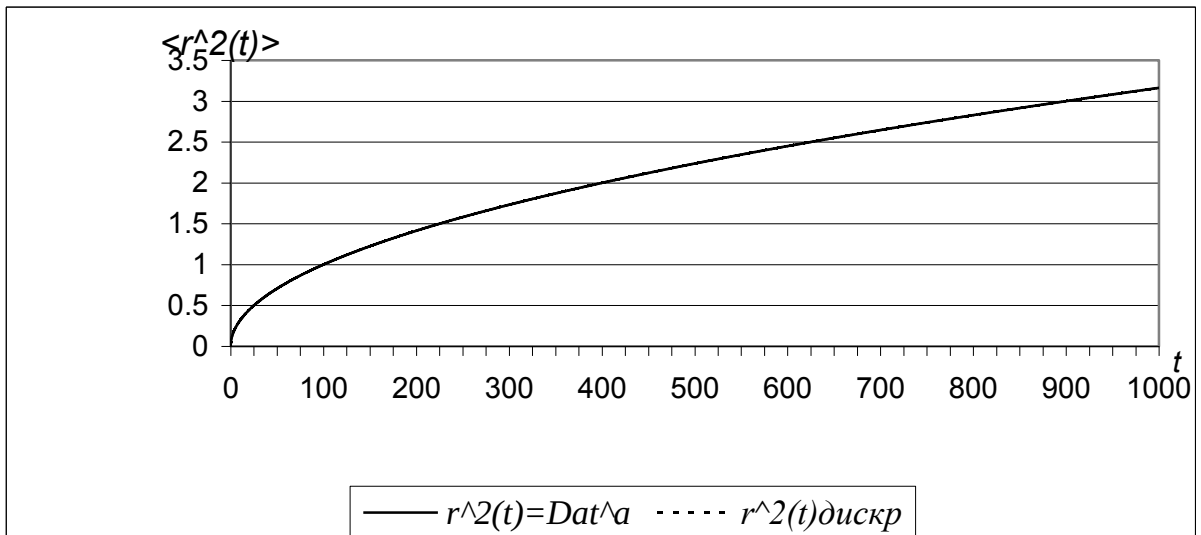


Рис.1.4. Сравнение графиков зависимости среднего квадрата перемещения от времени: полученного экспериментально $\langle r^2(t) \rangle_{\text{дискр}}$ и ожидаемого

$$\langle r^2(t) \rangle = D_\alpha t^\alpha, D_\alpha = 0.1, \alpha = 0.5$$

Графики $\langle r^2(t) \rangle_{\text{дискр}}$ для других значений α приближают функцию $\langle r^2(t) \rangle$ так же. Для наглядности графики отклонения функции $\langle r^2(t) \rangle_{\text{дискр}}$ от $\langle r^2(t) \rangle$ при малых и больших значениях t выведены на рис.1.5 и рис.1.6, соответственно. При помощи функции $f(t)$ вида (1.19) можно моделировать процессы субдиффузии с любыми заданными коэффициентами диффузии D_α , при соответствующем выборе коэффициента A .

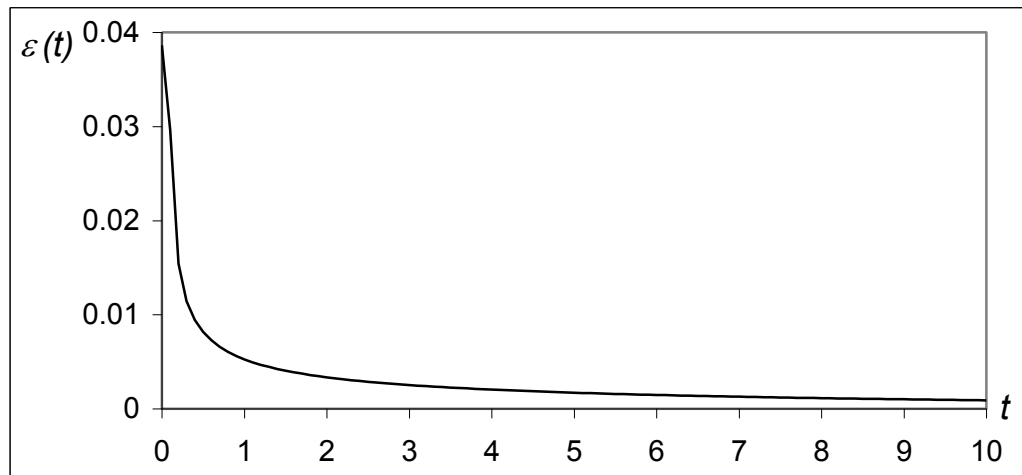


Рис.1.5. График отклонения $\varepsilon(t) = \langle r^2(t) \rangle - \langle r^2(t) \rangle_{\text{дискр}}$, $D_\alpha=0.1$, $\alpha=0.5$. При малых t значения $\varepsilon(t)$ достаточно велики

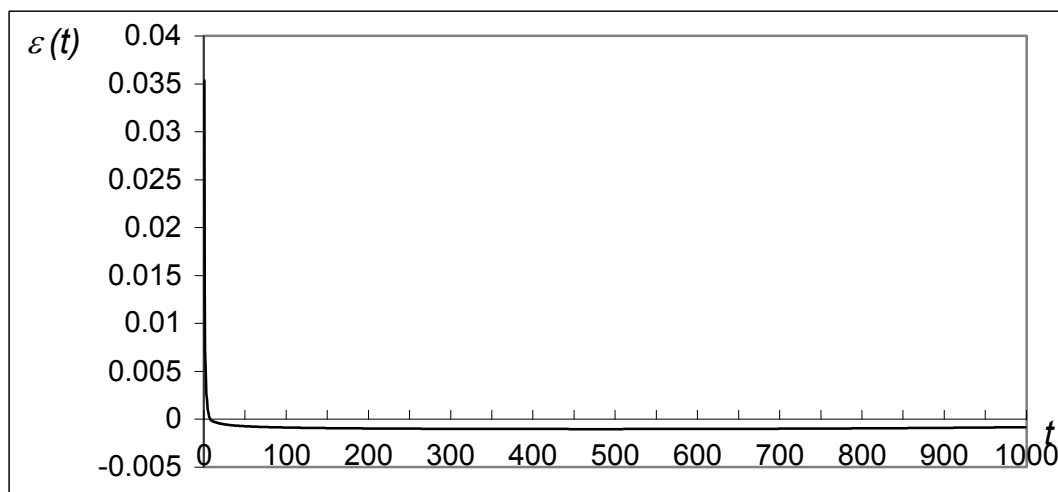


Рис.1.6. График отклонения $\varepsilon(t) = \langle r^2(t) \rangle - \langle r^2(t) \rangle_{\text{дискр}}$, $D_\alpha=0.1$, $\alpha=0.5$. При $t > \tau_0 \approx 10$ (приблизительно) отклонение становится достаточно малым

Заметим, что решения уравнения (1.15) будет зависеть от параметра h , причем для любых h мы получим субдиффузию со свойством (1.7), $\alpha \in (0,1)$. Размер пространственных ячеек h влияет только на «детализацию» конечного результата $p(\bar{x}, t)$.

Отметим, что существуют разные модели субдиффузии, в которых соблюдается условие (1.7), но блуждание происходит *различным образом*. Например, для модели субдиффузии (В), в которой частицы перемещаются по узлам решетки в R^n с задержками, справедливо свойство (1.7) с некоторыми параметрами D_α и α , и оно же имеет место для модели, в которой частицы перемещаются с такими же задержками в произвольном направлении с гауссовской функцией распределения длины перемещения. Это показано в следующей лемме.

Лемма 1.27. Для функций $f(t)$ и $\lambda(\bar{x})$, удовлетворяющих условиям

$$\tilde{f}(s) \sim \frac{1}{1 + \frac{nC^2}{D_\alpha \Gamma(\alpha+1)} s^\alpha} \quad \text{и} \quad \lambda(\bar{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}C} e^{-\frac{1}{2C^2} \sum_{i=1}^n x_i^2}, \quad (1.21)$$

для произвольной константы C , средний квадрат перемещения в CTRW-модели субдиффузии имеет вид (1.7).

Доказательство.

Подставляя в (1.9) функции

$$\hat{\lambda}(\bar{u}) = e^{-\frac{C^2}{2} \sum_{i=1}^n u_i^2}, \quad \frac{\partial \hat{\lambda}(\bar{u})}{\partial u_j} = -C^2 u_j \cdot e^{-\frac{C^2}{2} \sum_{i=1}^n u_i^2},$$

$$\frac{\partial^2 \hat{\lambda}(\bar{u})}{\partial u_j^2} = -C^2 e^{-\frac{C^2}{2} \sum_{i=1}^n u_i^2} + C^4 u_j^2 \cdot e^{-\frac{C^2}{2} \sum_{i=1}^n u_i^2},$$

получаем

$$\langle r^2(t) \rangle \sim L^{-1} \left(\frac{nC^2}{s} \cdot \frac{\tilde{f}(s)}{1 - \tilde{f}(s)} \right),$$

и подстановкой $\tilde{f}(s)$ получаем условие (1.7). Лемма 1.27 доказана.

Подчеркнем, что в рассматриваемой нами модели субдиффузии на решетке, частицы перемещаются за один шаг *равновероятно в один из соседних узлов* решетки.

1.4. Уравнение динамики концентрации с заданной функцией задержки при наличии источников и стоков

Выведенные в п.1.3. уравнения динамики концентрации в CTRW-модели для субдиффузии справедливы для процессов, в которых участвует постоянное количество вещества. Рассмотрим теперь процесс субдиффузии при наличии в пространстве некоторого источника. Основные результаты этого параграфа опубликованы в [28-30].

В случае субдиффузии с источником $g(\bar{x}, t)$ общее количество вещества изменяется со временем, и уравнение (1.5) удобно переписать в терминах концентрации $m(\bar{x}, t)$ (функция $p(\bar{x}, t)$ есть нормированная концентрация, безразмерная величина, а $m(\bar{x}, t)$ есть количество частиц (либо масса) в единице объема):

$$m(\bar{x}, t) = p(\bar{x}, t)M(t),$$

где $M(t)$ – общая концентрация частиц (либо массы) в момент времени t :

$$M(t) = \int_0^t d\tau \int_{R^n} g(\bar{x}, \tau) d\bar{x} + m_0(\bar{x}), \quad (1.22)$$

и $m_0(\bar{x}) = m(\bar{x}, 0)$ – начальная функция распределения вещества. Заметим, что $m_0(\bar{x})$ можно рассматривать как источник, действовавший в момент времени $t=0$. Тогда, обозначая через $G(\bar{x}, t)$ всю совокупность источников,

$$G(\bar{x}, t) = m_0(\bar{x})\delta(t) + g(\bar{x}, t),$$

получаем уравнение для $m(\bar{x}, t)$:

$$m(\bar{x}, t) = \int_{R^n} \lambda(\bar{x}') d\bar{x}' \int_0^t f(t') m(\bar{x} - \bar{x}', t - t') dt' + \int_0^t G(\bar{x}, t - t') F(t') dt' \quad (1.23)$$

Последнее слагаемое в (1.23) определяет концентрацию вещества, выделенного источником за время t в точке $\bar{x}$ и сохранившегося к моменту t в исходной точке.

Подставляя в уравнение (1.23) функции $\lambda(\bar{x})$, (1.14), и предполагая, что $f(t)$ удовлетворяет (1.16), получаем уравнения для $m(\bar{x}, t)$ для субдиффузионного процесса при наличии источника в R^n :

$$m(\bar{x}, t) = \frac{1}{2n} \int_0^t \sum_{i=1}^n (m(\bar{x} - \bar{e}_i h, t - t') + m(\bar{x} + \bar{e}_i h, t - t')) f(t') dt' + \int_0^t G(\bar{x}, t - t') F(t') dt' \quad (1.24)$$

Очевидно, наличие источников может повлиять на закон распространения вещества (1.7): могут измениться коэффициент диффузии или показатель аномальности. Следующая теорема дает формулу для определения зависимости среднего квадрата перемещения от времени в процессе субдиффузии с источниками.

Теорема 1.28. В случае субдиффузии с источником $G(\bar{x}, t)$, $\bar{x} = (x_1, \dots, x_n) \in R^n$ средний квадрат перемещения определяется по формуле

$$\langle r^2(t) \rangle \sim \frac{D_\alpha \int_0^t (t - \tau)^\alpha \hat{G}(\bar{u}, \tau) \Big|_{\bar{u}=0} d\tau - \int_0^t \left(\Delta \hat{G}(\bar{u}, \tau) + h^2 \hat{G}(\bar{u}, \tau) \right) \Big|_{\bar{u}=0} d\tau}{\int_{R^n} d\bar{x} \int_0^t G(\bar{x}, \tau) d\tau}, \quad (1.25)$$

где $\hat{G}(\bar{u}, t)$ – образ Фурье функции $G(\bar{x}, t)$, и $\Delta \hat{G}(\bar{u}, t)$ – лапласиан $\hat{G}(\bar{u}, t)$.

Доказательство.

По определению дисперсии и по утверждению 1.22,

$$\langle r^2(t) \rangle = \int_{R^n} \bar{x}^2 p(\bar{x}, t) d\bar{x} = \frac{1}{M(t)} \int_{R^n} \bar{x}^2 m(\bar{x}, t) d\bar{x} = -\frac{1}{M(t)} \Delta \hat{m}(\bar{u}, t) \Big|_{\bar{u}=0}, \quad (1.26)$$

Вычислим образ Фурье и Лапласа функции $m(\bar{x}, t)$. Преобразование Фурье и Лапласа от уравнения (1.23) дает:

$$\hat{m}(\bar{u}, s) = \tilde{f}(s) \sum_i \cos(u_i \Delta x_i) \hat{m}(\bar{u}, s) + \hat{G}(\bar{u}, s) \tilde{F}(s).$$

Тогда

$$\hat{m}(\bar{u}, s) = \frac{1 - \tilde{f}(s)}{s} \cdot \frac{\hat{G}(\bar{u}, s)}{1 - \tilde{f}(s) \sum_i \cos(u_i \Delta x_i)} \quad (1.27)$$

вычисляя вторые производные по u_i от (1.27) и подставляя $u_i=0$, получаем:

$$\Delta \hat{m}(\bar{u}, s) \Big|_{\bar{u}=0} = \sum_i \frac{\partial^2 \hat{m}(\bar{u}, s)}{\partial u_i^2} \Big|_{\bar{u}=0} = \frac{1}{s} \Delta \hat{G}(\bar{u}, s) \Big|_{\bar{u}=0} - \frac{h^2 \tilde{f}(s)}{s(1 - \tilde{f}(s))} \hat{G}(\bar{u}, s) \Big|_{\bar{u}=0} \quad (1.28)$$

Для функции $\tilde{f}(s)$ вида (1.16) выражение (1.28) принимает вид

$$\Delta \hat{m}(\bar{u}, s) \Big|_{\bar{u}=0} = \frac{1}{s} \Delta \hat{G}(\bar{u}, s) \Big|_{\bar{u}=0} - \left(\frac{D_\alpha \Gamma(\alpha+1)}{s^{\alpha+1}} - \frac{h^2}{s} \right) \hat{G}(\bar{u}, s) \Big|_{\bar{u}=0}. \quad (1.29)$$

Воспользуемся следующим известным свойством преобразования Лапласа L :

$$L(t^k) = \frac{\Gamma(k+1)}{s^{k+1}}, \quad k > -1 \quad (1.30)$$

Совершая обратное преобразование Лапласа от (1.29) с учетом (1.30), определяем:

$$\begin{aligned} \Delta \hat{m}(\bar{u}, t) \Big|_{\bar{u}=0} \sim & \int_0^t \Delta \hat{G}(\bar{u}, \tau) \Big|_{\bar{u}=0} d\tau - D_\alpha \int_0^t (t-\tau)^\alpha \hat{G}(\bar{u}, \tau) \Big|_{\bar{u}=0} d\tau + \\ & + \int_0^t h^2 \hat{G}(\bar{u}, \tau) \Big|_{\bar{u}=0} d\tau \end{aligned} \quad (1.31)$$

Далее подстановкой (1.22) и (1.31) в (1.26) получаем (1.25).

Теорема 1.28 доказана.

В ряде случаев выражение (1.25) значительно упрощается. Рассмотрим случай точечного источника переменной интенсивности $G_1(t)$, расположенного в начале координат.

Утверждение 1.29. В случае субдиффузии с точечным источником $G(\bar{x}, t)$ вида

$$G(\bar{x}, t) = \delta(\bar{x}) G_1(t) \quad (1.32)$$

рост среднего квадрата перемещения происходит по закону:

$$\langle r^2(t) \rangle \sim D_\alpha \frac{\int_0^t (t-\tau)^\alpha G_1(\tau) d\tau}{\int_0^t G_1(\tau) d\tau} - h^2 \quad (1.33)$$

Доказательство. Подстановкой в (1.25) выражений:

$$G(\bar{x}, \tau) = \delta(\bar{x}) G_1(\tau),$$

$$\hat{G}(\bar{u}, \tau) \Big|_{\bar{u}=0} = G_1(\tau), \quad \hat{G}''(\bar{u}, \tau) \Big|_{\bar{u}=0} = 0.$$

Утверждение 1.29 доказано.

Следствие 1.30. В случае субдиффузии с точечным источником $G(\bar{x}, t)$ вида (1.32) рост квадрата отклонения происходит медленнее, чем в субдиффузии без источников.

Доказательство.

Из (1.33) выводим:

$$\langle r^2(t) \rangle \sim D_\alpha \frac{\int_0^t (t-\tau)^\alpha G_1(\tau) d\tau}{\int_0^t G_1(\tau) d\tau} < D_\alpha \frac{\int_0^t t^\alpha G_1(\tau) d\tau}{\int_0^t G_1(\tau) d\tau} = D_\alpha t^\alpha.$$

Следовательно, в зависимости от вида источника либо уменьшается коэффициент субдиффузии D_α , либо вместо t^α в правой части (1.7) появляется функция от t , растущая медленнее, чем t^α .

Следствие 1.30 доказано.

Утверждение 1.31. В случае субдиффузии с точечным источником $G(\bar{x}, t)$ вида

$$G(\bar{x}, t) = \delta(\bar{x}) t^q, \quad (1.34)$$

выполняется:

$$\langle r^2(t) \rangle \sim K t^\alpha, \quad (1.35)$$

причем $K < D_\alpha$ при $q > (q_0 - 2)$, где q_0 – точка минимума гамма-функции $\Gamma(q)$ при $q > 0$.

Доказательство. Из (1.33) выводим:

$$\langle r^2(t) \rangle \sim D_\alpha \frac{\int_0^t (t-\tau)^\alpha G_1(\tau) d\tau}{\int_0^t G_1(\tau) d\tau} = D_\alpha \frac{\int_0^t (t-\tau)^\alpha \tau^q d\tau}{\int_0^t \tau^q d\tau} = \frac{D_\alpha (q+1)}{t^{q+1}} \int_0^t (t-\tau)^\alpha \tau^q d\tau$$

Заметим, что при $q > -1$ интегралы в числителе и знаменателе сходятся, следовательно, вычисление корректно. Для $q \leq -1$ интегралы в выражении (1.25) расходятся.

После замены переменных $w = \tau/t$ в последнем интеграле получаем:

$$\langle r^2(t) \rangle \sim \frac{D_\alpha (q+1)}{t^{q+1}} t^{q+\alpha+1} \int_0^1 (1-w)^\alpha w^q dw = D_\alpha (q+1) B(q+1, \alpha+1) t^\alpha,$$

$$\langle r^2(t) \rangle \sim K t^\alpha, \quad K = D_\alpha (q+1) B(q+1, \alpha+1),$$

где $B(q+1, \alpha+1)$ – бета-функция.

Обозначим точку минимума гамма-функции $\Gamma(q)$ при $q > 0$ через q_0 , тогда в силу монотонного возрастания $\Gamma(s)$ при $s > q_0$, при $q > q_0 - 2$ для любых α

$$\text{выполняется } (q+1)B(q+1, \alpha+1) = \frac{\Gamma(q+2)\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(q+\alpha+2)} < 1, \text{ причем } q > -1.$$

Утверждение 1.31 доказано.

Следствие 1.32. При целочисленных $q \geq -1$ справедливо:

$$\langle r^2(t) \rangle \sim t^\alpha D_\alpha \sum_{k=0}^q \frac{C_q^k}{q+1-k+\alpha}$$

в частности, при $q=0$ (постоянный источник): $\langle r^2(t) \rangle \sim \frac{D_\alpha}{1+\alpha} t^\alpha$.

Пусть теперь функция $G(\bar{x}, t)$, $\bar{x} \in R^n$, может принимать и отрицательные значения, т.е. может являться как источником, так и стоком. В этом случае концентрация вещества в точке $\bar{x}$ в момент времени t определяется общим интегральным уравнением CTRW-модели (A):

$$\begin{aligned} m(\bar{x}, t) = \max \{ & \int_{R^n} \lambda(\bar{x}') d\bar{x}' \int_0^t f(t') m(\bar{x} - \bar{x}', t - t') dt' + \\ & + \int_0^t G(\bar{x}, t - t') F(t') dt' ; 0 \} \end{aligned} \quad (1.36)$$

В отличие от уравнения субдиффузии с источником, здесь вводится функция $\max$, так как концентрация неотрицательна, в остальном рассмотрение стока не отличается от рассмотрения источника.

Тогда уравнение субдиффузии с источниками/стоками в модели субдиффузии (B) имеет вид:

в R^1 :

$$\begin{aligned} m(x, t) = \max \left\{ \frac{1}{2} \int_0^t (m(x - \Delta x, t - t') + m(x + \Delta x, t - t')) f(t') dt' + \right. \\ \left. + \int_0^t G(x, t - t') F(t') dt' ; 0 \right\}, \end{aligned} \quad (1.37)$$

в R^2 :

$$\begin{aligned} m(x, y, t) = \max \left\{ \frac{1}{4} \int_0^t (m(x - \Delta x, y, \tau) + m(x + \Delta x, y, \tau) + m(x, y - \Delta y, \tau) + \right. \\ \left. + m(x, y + \Delta y, \tau)) f(t - \tau) d\tau + \int_0^t G(x, y, t - t') F(t') dt' ; 0 \right\}, \end{aligned} \quad (1.38)$$

в R^3 :

$$m(x, y, z, t) = \max \left\{ \frac{1}{6} \int_0^t (m(x - \Delta x, y, z, \tau) + m(x + \Delta x, y, z, \tau) + m(x, y - \Delta y, z, \tau) + \right. \\ \left. + m(x, y + \Delta y, z, \tau) + m(x, y, z + \Delta z, \tau) + m(x, y, z - \Delta z, \tau)) \cdot f(t - \tau) d\tau + \right. \\ \left. + \int_0^t G(x, y, z, t - t') F(t') dt' ; 0 \right\}. \quad (1.39)$$

В силу построения уравнения, правая часть всегда будет ненулевой – либо она будет содержать информацию о начальных данных, либо информацию об источнике. Отсутствие правой части означает единственное решение $m(\bar{x}, t) = 0$.

1.5. Прямое стохастическое моделирование субдиффузии в R^n ($n=1,2,3$)

Построим стохастическую имитационную модель субдиффузии как прямую реализацию блуждания частиц в соответствии с системой аксиом (В).

1. Начальное распределение частиц.

Пусть начальное распределение вещества в области W в пространстве задано функцией $m_0(\bar{x})$. В узлах $\bar{x}_i$ решетки (нумерация узлов произвольна), по которой происходит блуждание, эта функция принимает значения $m_0(\bar{x}_i)$. Тогда суммарное количество вещества во всех узлах есть: $M(0) = \sum_i m_0(\bar{x}_i)$.

Единица концентрации при моделировании будет представлена некоторым постоянным количеством частиц S (каждая частица представляет собой некоторую порцию вещества в единице объема, рассматриваемую как единое целое). Чем больше величина S , тем точнее определяется искомая функция $m(\bar{x}, t)$.

Распределим по узлам решетки $K(0)$ частиц в соответствии с заданной функцией $m_0(\bar{x}_i)$. Обозначим количество частиц в узле $\bar{x}_i$ в момент времени

t через $k_i(t)$. Так как на единицу концентрации при моделировании приходится S частиц, то

$$S = \frac{K(0)}{M(0)} = \frac{k_i(0)}{m_0(\bar{x}_i)}. \quad (1.40)$$

Тогда при численном моделировании количество частиц $k_i(0)$ определяется приближенно как

$$k_i(0) = [S \cdot m_0(\bar{x}_i)]. \quad (1.41)$$

2. Реализация блуждания частиц.

Для определения функции $m(\bar{x}, t)$ в момент времени T рассмотрим реализацию блуждания частиц на временном интервале $[0; T]$. Блуждание частиц задается аксиомой 2 модели (В), следовательно, представляет собой чередование задержек и мгновенных перемещений по правилам:

- I. Каждая частица находится в некотором узле пространственной решетки, и для нее задается время задержки – случайная величина с плотностью вероятности $f(t)$ вида (1.19).
- II. По истечении времени задержки частица мгновенно перемещается равновероятно в один из соседних узлов в W .

Таким образом, для каждой частицы генерируется последовательность времен задержек $t_1, t_2, \dots, t_j, t_{j+1}$, удовлетворяющая условию:

$$t_1 + t_2 + \dots + t_j \leq T,$$

$$t_1 + t_2 + \dots + t_j + t_{j+1} > T,$$

и соответствующая j перемещениям частицы. Когда суммарное время задержек частицы достигнет T , ее координата фиксируется.

3. Моделирование субдиффузии с источниками и стоками.

При наличии источника $g(\bar{x}, t)$ постоянно будут добавляться новые частицы. Каждая из появившихся частиц вступает далее в блуждание согласно п.2.

Для моделирования источника интервал $[0, T]$ разбивается некоторым

образом на промежутки Δt_i , определяется концентрация вещества, выделяемая источником за каждый промежуток времени, и соответствующее этой концентрации при моделировании количество частиц g_i . Так как для моделирования единицы концентрации используется S частиц, то по истечении времени Δt_i в процесс добавляется $g_i S$ частиц.

При этом промежутки Δt_i по возможности определяются так, чтобы $g_i S$ было целым числом – тогда точность не теряется при приближении $g_i S$ целым количеством частиц. Тем не менее, при моделировании точность может потеряться, так как все выделенные источником за интервал Δt_i частицы вступают в блуждание после интервала Δt_i , хотя в реальности каждая частица начинает блуждать сразу после своего появления. Таким образом, в идеале необходимо подбирать интервалы Δt_i так, чтобы они соответствовали появлению ровно одной частицы за интервал – тогда отсутствует вынужденная задержка частицы до конца интервала Δt_i .

На практике подбор Δt_i , соответствующих появлению одной частицы, возможен для функций источника с аналитически определяемыми первообразными.

При наличии стока необходимо постоянно удалять определяемое стоком количество частиц. Интервал $[0, T]$ разбивается на промежутки Δt_i , и определяется количество частиц, удаляемое стоком за каждый промежуток Δt_i . Промежутки определяются так, чтобы количество удаленных частиц было целым числом, аналогично тому, как это сделано для источника. Далее частицы удаляются из узла, причем если в узле в данный момент находится меньше частиц, чем должно быть удалено, то удаляем только те, которые есть, так как количество частиц не может быть отрицательно (функция

концентрации положительна).

При этом общее количество частиц, использованных для моделирования, может быть оценено как $\tilde{K} = S \max_{0 \leq t \leq T} M(t)$, где $M(t)$ – общая концентрация вещества в момент времени t . Обозначая через $G(\bar{x}, t)$ всю совокупность источников и стоков $g(\bar{x}, t)$, и начального распределения $m_0(\bar{x})$:

$$G(\bar{x}, t) = m_0(\bar{x})\delta(t) + g(\bar{x}, t),$$

получаем

$$\tilde{K} = S \cdot \max_{0 \leq t \leq T} \int_W G(\bar{x}, t) d\bar{x}.$$

4. Определение искомой функции $m(\bar{x}, T)$.

После реализации блуждания K частиц в течение времени T подсчитываем итоговое количество частиц в каждом узле $k_i(T)$ и восстанавливаем приближенные значения $m_K(\bar{x}, T)$ функции $m(\bar{x}, T)$ по формуле:

$$m_K(\bar{x}_i, T) = \frac{k_i(T)}{S}. \quad (1.42)$$

1.6. Сходимость последовательности концентраций при увеличении числа испытаний

Покажем, что функция плотности, полученная в результате реализации блуждания, при увеличении количества блуждающих частиц сходится по вероятности к решению уравнения субдиффузии (1.24).

Пусть частицы в CTRW-модели блуждают по некоторому конечному либо счетному множеству узлов в R^n . Занумеруем узлы решетки в каком-либо порядке: $x_1, x_2, \dots, x_N$. и назовем элементарным событием ω_n попадание частицы в момент времени T в узел x_n . Обозначим $\Omega = \{\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_N\}$, A – множество всех подмножеств Ω , вероятность P события ω_n зададим по

формуле (1.15) и рассмотрим вероятностную модель (Ω, A, P) .

Выберем произвольный узел решетки x_n . Рассмотрим $K(T)$ независимых реализаций блуждания одной частицы ($K(T)$ испытаний). Определим случайную величину $\xi_i(n)$ как число появлений события ω_n в i -м испытании, т.е. $\xi_i(n) \in \{0,1\}$. Обозначим через $k_n(T)$ количество исходов ω_n в $K(T)$ испы-

таниях, $k_n(T) = \sum_{i=1}^{K(T)} \xi_i(n)$, т.е. $k_n(T)$ – это количество частиц, в момент време-

ни T находящихся в узле x_n . Нам потребуются две следующие теоремы, [57].

Теорема (Чебышева) 1.33. Пусть $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_K$ – последовательность независимых одинаково распределенных случайных величин с математическим ожиданием $M(\xi_i)=p$ и дисперсией $D(\xi_i)=D$. Тогда для любого $\varepsilon>0$ имеет место

$$P\left(\left|\frac{1}{K} \sum_{i=1}^K \xi_i - p\right| \geq \varepsilon\right) \leq \frac{D}{K\varepsilon^2}. \quad (1.43)$$

Теорема (Муавра-Лапласа) 1.34. Пусть имеется последовательность K испытаний Бернулли с вероятностью успеха p , тогда при $K \rightarrow \infty$ вероятность того, что количество z успехов ограничено, $z_1 \leq z \leq z_2$, есть:

$$P(z_1 \leq z \leq z_2) \approx \Phi\left(\frac{z_2 - Kp}{\sqrt{Kp(1-p)}}\right) - \Phi\left(\frac{z_1 - Kp}{\sqrt{Kp(1-p)}}\right), \quad (1.44)$$

где $\Phi(x)$ – стандартное нормальное распределение, D – дисперсия.

Теорема 1.35. Функция $m_{(K(T))}(\bar{x}_i, T)$, полученная в результате стохастической реализации блуждания $K(T)$ частиц, сходится по вероятности к решению уравнения (1.24), $m(x_n, T)$ при $K(T) \rightarrow \infty$.

Доказательство. Необходимо показать, что

$$\forall \delta > 0: \quad P\left(\left|m_{(K(T))}(x_n, t) - m(x_n, t)\right| \geq \delta\right) \xrightarrow{K \rightarrow \infty} 0.$$

Действительно,

$$\begin{aligned}
P\left(\left|m_{(K(T))}(\mathbf{x}_n, t) - m(\mathbf{x}_n, t)\right| \geq \delta\right) &= P\left(\left|\frac{k_n(T)}{K(T)}M(T) - p(\mathbf{x}_n, t)M(T)\right| \geq \delta\right) = \\
&= P\left(\left|\frac{k_n(T)}{K(T)} - p(\mathbf{x}_n, t)\right| \geq \frac{\delta}{M(T)}\right),
\end{aligned}$$

и по теореме Чебышева для введенных случайных величин $\xi_i(n)$ при $p = p(\mathbf{x}_n, T) = M(\xi_i(n)) = P(\omega_n)$, $D(\xi_i(n)) = p(1-p)$ получаем:

$$P\left(\left|\frac{k_n(T)}{K(T)} - p(\mathbf{x}_n, t)\right| \geq \frac{\delta}{M(T)}\right) \leq \frac{p(1-p)M^2(T)}{K(T)\delta^2} \xrightarrow{K \rightarrow \infty} 0$$

Теорема 1.35 доказана.

Очевидно, что точность рассмотренной стохастической модели зависит от количества частиц S , использованных для моделирования единицы концентрации. Точность стохастической модели будем оценивать через величину отклонения, определяемого как

$$\max_{x_i} \left| m_{(K(T))}(\bar{x}_i, T) - m(\bar{x}_i, T) \right|.$$

Выведем оценку требуемого для моделирования количества частиц при заданной точности. Требуемая оценка дается следующей леммой.

Лемма 1.36. Отклонение функции $m_{(K(T))}(\bar{x}_i, T)$ от $m(\bar{x}_i, T)$ не превышает ε с вероятностью P_0 при выполнении условия

$$S \geq \frac{M(T)}{4(1-P_0)\varepsilon^2}, \quad (1.45)$$

где $M(T)$ – общая концентрация вещества в момент времени T .

Доказательство. Оценим следующую вероятность:

$$\begin{aligned}
P\left(\left|m_{(K(T))}(\mathbf{x}_n, T) - m(\mathbf{x}_n, T)\right| < \varepsilon\right) &= P\left(\left|\frac{m_{(K(T))}(\mathbf{x}_n, T)}{M(T)} - \frac{m(\mathbf{x}_n, T)}{M(T)}\right| < \frac{\varepsilon}{M(T)}\right) = \\
&= P\left(\left|\frac{S}{K(T)} \frac{k_i(T)}{S} - p\right| < \frac{\varepsilon}{M(T)}\right) = P\left(\left|\frac{k_i(T)}{K(T)} - p\right| < \frac{\varepsilon}{M(T)}\right), \quad (1.46)
\end{aligned}$$

по теореме Чебышева справедливо

$$P\left(\left|\frac{k_i(T)}{K(T)} - p\right| < \frac{\varepsilon}{M(T)}\right) \geq 1 - \frac{p(1-p)}{K(T)\varepsilon^2} M^2(T),$$

далее, так как для $p < 1$ выполняется: $p(1-p) \leq 1/4$, то

$$P\left(\left|\frac{k_i(T)}{K(T)} - p\right| < \frac{\varepsilon}{M(T)}\right) \geq 1 - \frac{M^2(T)}{4K(T)\varepsilon^2} = 1 - \frac{M(T)}{4S\varepsilon^2}.$$

Тогда для того, чтобы вероятность отклонения не менее, чем на ε была не менее P_0 , должно выполняться:

$$1 - \frac{M(T)}{4S\varepsilon^2} \geq P_0,$$

откуда следует (1.45). Лемма 1.36 доказана.

Также оценку требуемого для моделирования количества частиц можно получить на основании теоремы Муавра-Лапласа.

Лемма 1.37. Отклонение функции $\tilde{m}(\bar{x}_i, T)$ от $m(\bar{x}_i, T)$ не превышает ε с вероятностью P_0 при выполнении условия

$$S \geq \frac{M(T)}{4\varepsilon^2} \left(\Phi^{-1}\left(\frac{1-P_0}{2}\right) \right)^2. \quad (1.47)$$

Доказательство. Из формул (1.46) и (1.44) следует, что

$$\begin{aligned} P\left(\left|m_{(K(T))}(x_n, T) - m(x_n, T)\right| < \varepsilon\right) &= P\left(\left|\frac{k_n(T) - pK(T)}{\sqrt{DK(T)}}\right| < \frac{\varepsilon\sqrt{K(T)}}{M(T)\sqrt{D}}\right) \approx \\ &\approx 1 - 2\Phi\left(\frac{-\varepsilon\sqrt{K(T)}}{M(T)\sqrt{D}}\right) = 1 - 2\Phi\left(\frac{-\varepsilon\sqrt{S}}{\sqrt{M(T)D}}\right) \geq 1 - 2\Phi\left(-2\varepsilon\sqrt{\frac{S}{M(T)}}\right), \end{aligned}$$

Тогда для выполнения условия

$$1 - 2\Phi\left(-2\varepsilon\sqrt{\frac{S}{M(T)}}\right) \geq P_0$$

требуется

$$S \geq \frac{M(T)}{4\varepsilon^2} \left(\Phi^{-1}\left(\frac{1-P_0}{2}\right) \right)^2.$$

Лемма 1.37 доказана.

Замечание 1.38. Так как оценка S по формуле Муавра-Лапласа является более точной, то при определении количества частиц, требуемого для моделирования субдиффузии с заданной точностью, мы рекомендуем оценку (1.47). Сравнение оценок приведено в табл.1.1.

Таблица 1.1

Сравнение оценок величины S , полученных по формулам (1.45) и (1.47)

Вероятность Оценка	$P_0 = 0.95$	$P_0 = 0.99$	$P_0 = 0.999$
из формулы Чебышева (1.45)	$S \geq 5 \cdot \frac{M(T)}{\varepsilon^2}$	$S \geq 25 \cdot \frac{M(T)}{\varepsilon^2}$	$S \geq 250 \cdot \frac{M(T)}{\varepsilon^2}$
из формулы Муавра- Лапласа (1.47)	$S \geq 0.96 \cdot \frac{M(T)}{\varepsilon^2}$	$S \geq 1.66 \cdot \frac{M(T)}{\varepsilon^2}$	$S \geq 2.7 \cdot \frac{M(T)}{\varepsilon^2}$

ГЛАВА 2. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ СУБДИФФУЗИИ НА ЕВКЛИДОВЫХ РЕШЕТКАХ

В этой главе для модели (В) субдиффузии, построенной в главе I, разрабатываются методы численной реализации. Первый метод состоит в аппроксимации интегроразностного уравнения динамики концентрации частиц численной схемой на основе квадратурной формулы трапеций. Построены численные схемы в R^1 , R^2 и R^3 , определен порядок аппроксимации и сходимости этих схем. Второй метод разработан для решения трудоемких задач в R^2 и R^3 : построены экономичные численные схемы расщепления, определены их аппроксимация и сходимость. Третий метод состоит в моделировании субдиффузии блужданием, т.е. представляет собой прямую реализацию стохастической модели п.1.4. Все методы построены для моделирования субдиффузии с источниками.

Приводятся сравнительные характеристики представленных численных методов по быстродействию и точности решения.

Приведены фундаментальные численные решения начально-краевых задач для разных значений параметра α .

На основе построенных численных методов разработан описанный в главе 3 программный комплекс для компьютерного имитирования процессов субдиффузии в материалах со сложной геометрией порового пространства.

Результаты этой главы опубликованы в [28,30-31, 42-44].

2.1. Численное решение интегроразностного уравнения субдиффузии в R^1

Определим решение уравнения (1.24) в R^1 , $\bar{x}=(x,y)$, в пространственной области Ω на временном интервале $[0,T]$.

Пусть I – множество целых чисел такое, что $i \in I \Leftrightarrow x_0 + i\Delta x \in \Omega$.

Обозначим $\Delta x = h$. В рассматриваемой области Ω введем сетку $\bar{\omega} = \bar{\omega}_{\Delta t}^t \times \bar{\omega}_h^x$, где $\bar{\omega}_{\Delta t}^t$, $\bar{\omega}_h^x$ – равномерные одномерные сетки

$$\bar{\omega}_h^x = \{x_i = x_0 + ih; \quad i \in I\},$$

$$\bar{\omega}_{\Delta t}^t = \{t_n = n\tau; \quad n = 0, \dots, N; \quad \tau N = T\}.$$

Обозначим $m_i^n = m(x_i, t_n)$.

Введем пространство сеточных функций U_h . Через u_h будем обозначать сеточные функции (определенные только в узлах сетки $\bar{\omega}$), а через $(u)_h$ обозначим значения функции $u(x, t)$, взятые в узлах сетки $\bar{\omega}$.

Мы будем использовать локальную сеточную норму в U_h :

$$\|u_h\|_{U_h} = \max_{0 \leq n \leq N} \|u^n\|_{U_h},$$

норму на n -слое по времени:

$$\|u^n\|_{U_h} = \max_{i \in I} |u_i^n|.$$

Нам потребуются следующие основные понятия, [6].

Определение 2.1, [6]. Решение u_h задачи $L_h u_h = \varphi_h$ сходится к решению (u) задачи $Lu = \varphi$, если:

$$\|(u)_h - u_h\|_{U_h} \xrightarrow{h \rightarrow 0} 0.$$

Если при этом выполнено неравенство

$$\|(u)_h - u_h\|_{U_h} \leq Ch^k,$$

где C – постоянная, не зависящая от h , то имеет место сходимость порядка h^k

Определение 2.2, [6]. Задача $L_h u_h = \varphi_h$ аппроксимирует задачу $Lu = \varphi$ на ее решении (u) с порядком h^p , если выполняется:

$$\|L_h(u)_h - \varphi_h\|_{F_h} \leq C_1 h^k.$$

Определение 2.3, [6]. Аппроксимация $L_h(u)$ оператора $L(u)$ называется устойчивой, если $\exists h_0$ и $\delta > 0$ такие что $\forall h < h_0$ и $\forall \varepsilon_h \in F_h$: $\|\varepsilon_h\| \leq \delta$ задача, полученная из исходной возмущением правой части:

$$L_h v_h = f_h + \varepsilon_h,$$

имеет единственное решение, причем выполняется

$$\|u_h - v_h\|_{u_h} \leq C_2 \|\varepsilon_h\|,$$

где C_2 не зависит от h .

Теорема 2.4, [6]. Если задача $L_h u_h = \varphi_h$ аппроксимирует задачу $Lu = \varphi$ на ее решении (u) с порядком h^p и устойчива, то решение u_h задачи $L_h u_h = \varphi_h$ сходится к $(u)_h$, причем

$$\|(u)_h - u_h\|_{U_h} \leq C_1 C_2 h^k.$$

Обозначим слагаемое, отвечающее за действие источника $g(x, t)$ в уравнении (1.24) в R^1 субдиффузии через

$$\tilde{G}(x, t) = \int_0^t g(x, t - t') F(t') dt'.$$

В общем случае можно считать, что функция источника $\tilde{G}(x, t)$ задана в рассматриваемой области $\Omega \times [0, T]$.

Рассмотрим следующие три задачи для уравнения субдиффузии (1.24) в R^1 .

1) Пусть субдиффузионный процесс происходит на отрезке $\Omega = [x_a, x_b]$, и пусть частицы при движении не покидают отрезок и отражаются от границ. Тогда на границах $x = x_a, x = x_b$ уравнение (1.24) в R^1 принимает вид:

$$\begin{cases} m(x_a, t) = \frac{1}{2} \int_0^t (m(x_a, t-t') + m(x_a + h, t-t')) f(t') dt' + m_0(x_a) F(t) + \tilde{G}(x_a, t), \\ m(x_b, t) = \frac{1}{2} \int_0^t (m(x_b, t-t') + m(x_b - h, t-t')) f(t') dt' + m_0(x_b) F(t) + \tilde{G}(x_b, t), \end{cases}$$

т. е. на границу частицы могут попасть двумя способами:

- частица шагает в граничный узел из внутреннего узла с вероятностью 1/2.
- частица изначально находится в граничном узле, совершая шаг, она с вероятностью 1/2 шагает «за границу», отталкивается от границы и снова остается в граничном узле.

Поставим в этом случае следующую начально-краевую задачу:

$$\begin{cases} m(x, t) = \frac{1}{2} \int_0^t (m(x-h, t-t') + m(x+h, t-t')) f(t') dt' + \\ \quad \quad \quad + m_0(x) F(t) + \tilde{G}(x, t); \\ m(x_a, t) = \frac{1}{2} \int_0^t (m(x_a, t-t') + m(x_a + h, t-t')) f(t') dt' + \\ \quad \quad \quad + m_0(x_a) F(t) + \tilde{G}(x_a, t); \\ m(x_b, t) = \frac{1}{2} \int_0^t (m(x_b, t-t') + m(x_b - h, t-t')) f(t') dt' + \\ \quad \quad \quad + m_0(x_b) F(t) + \tilde{G}(x_b, t); \end{cases} \quad (2.1)$$

отметим, что начальное условие $m(x, 0) = m_0(x)$ получается в (2.1) подстановкой $t=0$ в первое уравнение.

Положим $x_b - x_a = Kh$, тогда $x_i = x_a + ih$.

Рассмотрим аппроксимацию интеграла по формуле трапеций. При этом полагаем:

$$\int_0^t g(x_i, t-t') F(t') dt' \approx \sum_{n=0}^N g(x_i, t_n) F(t_{N-n}) \tau = \tilde{G}_i^N.$$

Тогда численная схема для решения задачи (2.1) имеет вид:

$$\left\{ \begin{aligned}
m_i^n &= \frac{\tau}{2} \sum_{s=1}^{n-1} (m_{i-1}^s + m_{i+1}^s) f_{n-s} + \frac{\tau}{4} (m_{i-1}^0 + m_{i+1}^0) f_n + \\
&\quad + \frac{\tau}{4} (m_{i-1}^n + m_{i+1}^n) f_0 + m_i^0 F_n + \check{G}_i^n, \quad i \in [1, K-1]; \\
m_0^n &= \frac{\tau}{2} \sum_{s=1}^{n-1} (m_1^s + m_0^s) f_{n-s} + \frac{\tau}{4} (m_1^0 + m_0^0) f_n + \\
&\quad + \frac{\tau}{4} (m_1^n + m_0^n) f_0 + m_0^0 F_n + \check{G}_0^n; \\
m_K^n &= \frac{\tau}{2} \sum_{s=1}^{n-1} (m_{K-1}^s + m_K^s) f_{n-s} + \frac{\tau}{4} (m_{K-1}^0 + m_K^0) f_n + \\
&\quad + \frac{\tau}{4} (m_{K-1}^n + m_K^n) f_0 + m_K^0 F_n + \check{G}_K^n; \\
n &= 1, \dots, N; \\
m_i^0 &= m_0(x_i), \quad 0 \leq i \leq K;
\end{aligned} \right. \quad (2.2)$$

шаблон для вычислений см. рис.2.1. Отметим, что для определения функции m_i^n на каждом слое n по времени используются значения m_i^s на всех предыдущих слоях.

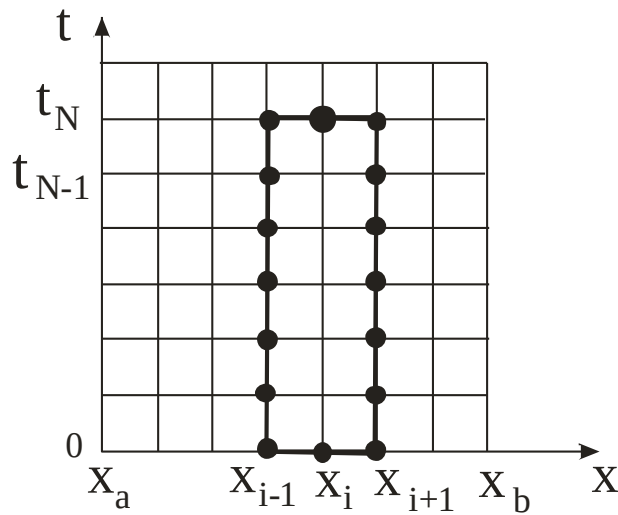


Рис.2.1. Шаблон для вычислений m_i^N для схемы (2.2)

Теорема 2.5. Для задачи (2.2) внесение в численную задачу возмущения порядка $\|\varepsilon_h\|$ приводит к возмущению решения не более

$$\frac{4}{f_0\tau} e^{f_0 T} \|\varepsilon_h\|.$$

Доказательство.

Оценим погрешность решения, полученную в результате внесения в

схему погрешности $\varepsilon^n = \begin{pmatrix} \varepsilon_0^n \\ \varepsilon_i^n \\ \varepsilon_K^n \end{pmatrix}$, $\|\varepsilon_h\| = \max_{0 \leq n \leq N} |\varepsilon^n|$. Вычитая из возмущенной

схемы исходную, получим задачу для погрешности v_i^n на слое n :

$$v_i^n = u_i^n - m_i^n:$$

$$\left\{ \begin{array}{l} v_i^n = \frac{\tau}{2} \sum_{s=1}^{n-1} (v_{i-1}^s + v_{i+1}^s) f_{n-s} + \frac{\tau}{4} (v_{i-1}^0 + v_{i+1}^0) f_n + \\ \quad + \frac{\tau}{4} (v_{i-1}^n + v_{i+1}^n) f_0 + v_i^0 F_n + \varepsilon_i^n, \\ v_0^n = \frac{\tau}{2} \sum_{s=1}^{n-1} (v_1^s + v_0^s) f_{n-s} + \frac{\tau}{4} (v_1^0 + v_0^0) f_n + \\ \quad + \frac{\tau}{4} (v_1^n + v_0^n) f_0 + v_0^0 F_n + \varepsilon_0^n; \\ v_K^n = \frac{\tau}{2} \sum_{s=1}^{n-1} (v_{K-1}^s + v_K^s) f_{n-s} + \frac{\tau}{4} (v_{K-1}^0 + v_K^0) f_n + \\ \quad + \frac{\tau}{4} (v_{K-1}^n + v_K^n) f_0 + v_K^0 F_n + \varepsilon_K^n, \\ v_i^0 = \varepsilon_i^0. \end{array} \right.$$

Тогда для всех n справедлива оценка:

$$|v_i^n| \leq \sum_{s=1}^{n-1} 2 \max_{0 \leq i \leq n-1} |v_i^s| \cdot \frac{\tau}{2} \cdot f_{n-s} + \frac{\tau}{4} f_n \cdot 2 \max_{0 \leq i \leq n-1} |v_i^0| +$$

$$+ \frac{\tau}{4} f_0 \cdot 2 \max_{0 \leq i \leq n-1} |v_i^n| + |v_i^0| F_n + \max_{0 \leq i \leq n-1} |\varepsilon_i^n|,$$

откуда следует:

$$\|v^n\| \leq \frac{\tau}{2} f_0 \|v^n\| + \max_{0 \leq s \leq n-1} \|v^s\| \left(\sum_{s=1}^{n-1} f_{n-s} \tau + \frac{\tau}{2} f_n + F_n \right) + \|\varepsilon^n\|.$$

Тогда

$$\begin{aligned} \|v^n\| &\leq \frac{1}{1 - \frac{f_0 \tau}{2}} \left(\max_{0 \leq s \leq n-1} \|v^s\| + \|\varepsilon^n\| \right) \leq \\ &\leq \frac{1}{1 - \frac{f_0 \tau}{2}} \left(\frac{1}{1 - \frac{f_0 \tau}{2}} \left(\max_{0 \leq s \leq n-2} \|v^s\| + \|\varepsilon^{n-1}\| \right) + \|\varepsilon^n\| \right) \leq \dots \leq \\ &\leq 2 \max_{0 \leq s \leq n} |\varepsilon^s| \left(\frac{1}{1 - \frac{f_0 \tau}{2}} + \frac{1}{\left(1 - \frac{f_0 \tau}{2}\right)^2} + \dots + \frac{1}{\left(1 - \frac{f_0 \tau}{2}\right)^n} \right) \leq \\ &\leq \max_{0 \leq s \leq n} |\varepsilon^s| \cdot \frac{4}{f_0 \tau} \left(\left(\frac{1}{1 - \frac{f_0 \tau}{2}} \right)^n - 1 \right) \leq \frac{4}{f_0 \tau} \max_{0 \leq s \leq n} |\varepsilon^s| \left(\left(\frac{1}{1 - \frac{f_0 \tau}{2}} \right)^N - 1 \right) \leq \\ &= \frac{4}{f_0 \tau} \max_{0 \leq s \leq n} |\varepsilon^s| \left(\left(\frac{1 + \frac{\frac{f_0 \tau}{2}}{1 - \frac{f_0 \tau}{2}}}{1 - \frac{f_0 \tau}{2}} \right)^N - 1 \right) \leq \frac{4}{f_0 \tau} \max_{0 \leq s \leq n} |\varepsilon^s| (e^{f_0 T} - 1). \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\|v_h\|_{u_h} = \max_{0 \leq n \leq N} |v^n| \leq \frac{4}{f_0 \tau} \max_{0 \leq n \leq N} |\varepsilon^n| (e^{f_0 T} - 1) = \frac{4}{f_0 \tau} \|\varepsilon_h\| e^{f_0 T}.$$

Теорема 2.5 доказана.

Теорема 2.6. Задача (2.2) аппроксимирует задачу (2.1) на ее решении m с точностью $O(\tau^2)$, и имеет место сходимость:

$$\|m_h - (m)_h\|_{u_h} \leq C\tau. \quad (2.3)$$

Доказательство. Первое утверждение следует из того, что аппроксимация интеграла по формуле трапеций имеет порядок $O(\tau^2)$.

Докажем оценку сходимости решения (2.3). Так как для аппроксимации выполняется $\|\varepsilon_h\|_{u_h} \leq \tau^2$, то по теореме 2.5 справедливо:

$$\|m_h - (m)_h\|_{u_h} \leq \tau^2 \frac{4}{f_0\tau} e^{\frac{f_0 T}{2}} = C\tau.$$

Теорема 2.6 доказана.

Замечание 2.7. Необходимо отметить следующий момент. В силу специфики задачи (2.1), какая бы схема ни использовалась для вычислений, она будет устойчива лишь при некоторых условиях: в определении устойчивости C_2 всегда будет зависеть от τ . Дело в том, что погрешность быстро накапливается при последовательном вычислении $m_i^0, m_i^1, \dots, m_i^N$, так как при вычислении каждого значения m_i^n используются значения m_i^s на всех предыдущих слоях по времени.

Таким образом, порядок сходимости схемы всегда будет ниже порядка аппроксимации, следовательно, численные схемы первого порядка точности (формулы прямоугольников) вообще неприменимы для решения задачи (2.1).

Для решения задачи (2.2) рассмотрим ее матричную схему. Обозначим единичную матрицу размера $(K+1) \times (K+1)$ через E , и введем следующие обозначения:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 1 \end{pmatrix}_{(K+1) \times (K+1)}, \text{ и } \bar{m}^n = \begin{pmatrix} m_0^n \\ m_1^n \\ \dots \\ m_K^n \end{pmatrix},$$

тогда получим представление задачи (2.2) в матричном виде

$$\begin{aligned} \left(E - \frac{\tau}{4} f_0 A\right) \bar{m}^n &= \frac{\tau}{2} f_1 A \bar{m}^{n-1} + \frac{\tau}{2} f_2 A \bar{m}^{n-2} + \dots + \frac{\tau}{2} f_{n-1} A \bar{m}^1 + \\ &+ \left(F_n \cdot E + \frac{\tau}{4} f_n A\right) \bar{m}^0 + E \cdot \check{G}^n \end{aligned} \quad (2.4)$$

Для определения $\bar{m}^n$ необходимо предварительно вычислить $\bar{m}^1$, $\bar{m}^2, \dots, \bar{m}^{n-1}$, после чего для определения $(K+1)$ координат вектора $\bar{m}^n$ получаем систему $(K+1)$ уравнений с известной правой частью. Обозначим

$$\left\{ \begin{aligned} b_i^n &= \frac{\tau}{2} \sum_{s=1}^{n-1} (m_{i-1}^s + m_{i+1}^s) f_{n-s} + \frac{\tau}{4} (m_{i-1}^0 + m_{i+1}^0) f_n + m_i^0 F_n + \\ &\quad + \check{G}_i^n, \quad i \in [1, K-1] \\ b_0^n &= \frac{\tau}{2} \sum_{s=1}^{n-1} (m_1^s + m_0^s) f_{n-s} + \frac{\tau}{4} (m_1^0 + m_0^0) f_n + m_0^0 F_n + \check{G}_0^n, \\ b_K^n &= \frac{\tau}{2} \sum_{s=1}^{n-1} (m_{K-1}^s + m_K^s) f_{n-s} + \frac{\tau}{4} (m_{K-1}^0 + m_K^0) f_n + m_K^0 F_n + \check{G}_K^n \end{aligned} \right. \quad (2.5)$$

Тогда система для определения $\bar{m}^n$ примет вид:

$$\begin{cases} (1 - \frac{\tau}{4} f_0) m_0^n - \frac{\tau}{4} f_0 m_1^n = b_0^n \\ -\frac{\tau}{4} f_0 m_{i-1}^n + m_i^n - \frac{\tau}{4} f_0 m_{i+1}^n = b_i^n, \quad 1 \leq i \leq K-1 \\ -\frac{\tau}{4} f_0 m_{K-1}^n + (1 - \frac{\tau}{4} f_0) m_K^n = b_K^n \end{cases} \quad (2.6)$$

Решим эту систему прогонкой. Определим коэффициенты. Из первого

уравнения выражаем m_0^n :

$$m_0^n = \frac{1}{(1 - \frac{\tau}{4} f_0)} (b_0^n + \frac{\tau}{4} f_0 m_1^n) = C_0 m_1^n + \varphi_0, \quad C_0 = \frac{\frac{\tau}{4} f_0}{(1 - \frac{\tau}{4} f_0)}, \quad \varphi_0 = C_0 \frac{1}{\frac{\tau}{4} f_0} b_0^n.$$

и, подставляя найденное m_0^n во второе уравнение системы, выражаем m_1^n :

$$m_1^n = C_1 m_2^n + \varphi_1, \quad C_1 = \frac{\frac{\tau}{4} f_0}{1 - \frac{\tau}{4} f_0 C_0}, \quad \varphi_1 = C_1 (\frac{1}{\frac{\tau}{4} f_0} b_1^n + \varphi_0)$$

далее аналогично получаем:

$$m_i^n = C_i m_{i+1}^n + \varphi_i, \quad C_i = \frac{\frac{\tau}{4} f_0}{1 - \frac{\tau}{4} f_0 C_{i-1}}, \quad \varphi_i = C_i (\frac{1}{\frac{\tau}{4} f_0} b_i^n + \varphi_{i-1}),$$

и из последнего уравнения определяем

$$m_K^n = \frac{b_K^n + \frac{\tau}{4} f_0 \varphi_{K-1}}{1 - \frac{\tau}{4} f_0 (1 + C_{K-1})}.$$

Получаем следующие **формулы прогонки** для решения системы:

сначала определяем коэффициенты $\varphi_i, C_i, i=0, \dots, K-1$ по формулам

$$\left\{ \begin{array}{l} C_0 = \frac{\frac{\tau}{4} f_0}{(1 - \frac{\tau}{4} f_0)}, \quad \varphi_0 = C_0 \frac{1}{\frac{\tau}{4} f_0} b_0^n \\ \\ C_i = \frac{\frac{\tau}{4} f_0}{1 - \frac{\tau}{4} f_0 C_{i-1}}, \quad \varphi_i = C_i (\frac{1}{\frac{\tau}{4} f_0} b_i^n + \varphi_{i-1}) \end{array} \right. \quad (2.7)$$

И далее вычисляем решение $m_i^n, i = 0, \dots, K-1$ по формулам

$$\begin{cases} m_K^n = \frac{b_K^n + \frac{\tau}{4} f_0 \varphi_{K-1}}{1 - \frac{\tau}{4} f_0 (1 + C_{K-1})} \\ m_i^n = C_i m_{i+1}^n + \varphi_i, \quad i = K-1, \dots, 0 \end{cases} \quad (2.8)$$

Определим временные затраты на реализацию этого метода. На каждом шаге n для вычислений требуется количество умножений порядка Kn , в совокупности для определения m_i^N – порядка $O(KN^2/2)$.

2) Пусть начальная функция $m_0(x)$ задана на интервале $\Omega = [x_a, x_b]$ и периодически продолжается в обе стороны. Очевидно, краевые условия примут вид

$$\begin{cases} m(x_a, t) = \frac{1}{2} \int_0^t (m(x_b, t-t') + m(x_a + \Delta x, t-t')) f(t') dt' + m_0(x_a) F(t) + \check{G}(x_a, t); \\ m(x_b, t) = \frac{1}{2} \int_0^t (m(x_a, t-t') + m(x_b - \Delta x, t-t')) f(t') dt' + m_0(x_b) F(t) + \check{G}(x_b, t); \end{cases}$$

Для такой начально-краевой задачи численная схема имеет вид:

$$\begin{cases} m_i^n = \frac{\tau}{2} \sum_{s=1}^{n-1} (m_{i-1}^s + m_{i+1}^s) f_{n-s} + \frac{\tau}{4} (m_{i-1}^0 + m_{i+1}^0) f_n + \\ \quad + \frac{\tau}{4} (m_{i-1}^n + m_{i+1}^n) f_0 + m_i^0 F_n + \check{G}_i^n, \quad i \in [1, K-1]; \\ m_0^n = \frac{\tau}{2} \sum_{s=1}^{n-1} (m_K^s + m_1^s) f_{n-s} + \frac{\tau}{4} (m_K^0 + m_1^0) f_n + \\ \quad + \frac{\tau}{4} (m_K^n + m_1^n) f_0 + m_0^0 F_n + \check{G}_0^n; \\ m_K^n = \frac{\tau}{2} \sum_{s=1}^{n-1} (m_{K-1}^s + m_0^s) f_{n-s} + \frac{\tau}{4} (m_{K-1}^0 + m_0^0) f_n + \\ \quad + \frac{\tau}{4} (m_{K-1}^n + m_0^n) f_0 + m_K^0 F_n + \check{G}_K^n, \\ m_i^0 = m_0(x_i), \quad 0 \leq i \leq I. \end{cases} \quad (2.9)$$

Для численной задачи (2.9) имеет место такая же оценка сходимости, как для задачи (2.2), доказательство аналогично доказательству теоремы 2.6.

Матрица системы (2.10) имеет вид:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & d & 0 & 0 & \dots & 0 & d \\ d & 1 & d & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & d & 1 & d & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & d \\ d & 0 & 0 & 0 & \dots & d & 1 \end{pmatrix}_{(K+1) \times (K+1)}, \quad d = -\frac{\tau^2}{4} f_0.$$

Обозначим

$$b_i^n = \frac{\tau}{2} \sum_{s=1}^{n-1} (m_{i-1}^s + m_{i+1}^s) f_{n-s} + \frac{\tau}{4} (m_{i-1}^0 + m_{i+1}^0) f_n + m_i^0 F_n + \tilde{G}_i^n, \quad i \in [1, K-1],$$

$$b_0^n = \frac{\tau}{2} \sum_{s=1}^{n-1} (m_K^s + m_0^s) f_{n-s} + \frac{\tau}{4} (m_K^0 + m_0^0) f_n + m_0^0 F_n + \tilde{G}_0^n,$$

$$b_K^n = \frac{\tau}{2} \sum_{s=1}^{n-1} (m_{K-1}^s + m_0^s) f_{n-s} + \frac{\tau}{4} (m_{K-1}^0 + m_0^0) f_n + m_K^0 F_n + \tilde{G}_K^n,$$

Тогда можно показать, что алгоритм гауссовского типа дает следующие формулы для решения задачи (2.9):

$$\begin{cases} \eta_0 = -d, & \psi_0 = -d, & \varphi_0 = b_0^n; \\ \eta_i = \frac{-d}{1+d\eta_{i-1}}, & \psi_i = \frac{-d}{1+d\eta_{i-1}} \psi_{i-1}, & \varphi_i = \frac{b_i^n - d\varphi_{i-1}}{1+d\eta_{i-1}}, \quad i = 1, \dots, K-1; \\ A_0 = \frac{-d}{d\eta_{K-1} + d\psi_{K-1} + 1}, & B_0 = \frac{b_K^n - d\varphi_{K-1}}{d\eta_{K-1} + d\psi_{K-1} + 1}; \\ A_i = \frac{A_{i-1}\eta_{i-1}}{1-\psi_{i-1}A_{i-1}}, & B_i = \frac{A_{i-1}\varphi_{i-1} + B_{i-1}}{1-\psi_{i-1}A_{i-1}}, \quad i = 1, \dots, K-1; \end{cases}$$

$$\begin{cases} \alpha_K = A_0 S_0, & \beta_K = \frac{\psi_0 B_0 + \varphi_0}{1 - \psi_0 A_0} A_0 + B_0; \\ \alpha_i = \frac{\eta_i}{1 - \psi_i A_i} \alpha_{i+1}, & \beta_i = \frac{\eta_i}{1 - \psi_i A_i} \beta_{i+1} + \frac{\psi_i B_i + \varphi_i}{1 - \psi_i A_i}, \quad i = K-1, \dots, 1; \\ m_1^n = \frac{\beta_1}{1 - \alpha_1}; \\ m_i^n = \alpha_i m_{i+1}^n + \beta_i, \quad i = K-1, \dots, 0. \end{cases} \quad (2.10)$$

3) Пусть блуждание происходит на всем R^1 , но начальная функция $m_0(x)$ задана на ограниченном интервале, т.е. изначально частицы расположены в некоторой ограниченной области. Тогда краевые условия отсутствуют, и численная задача имеет вид:

$$\begin{cases} m_i^n = \frac{\tau}{2} \sum_{s=1}^{n-1} (m_{i-1}^s + m_{i+1}^s) f_{n-s} + \frac{\tau}{4} (m_{i-1}^0 + m_{i+1}^0) f_n + \\ \quad + \frac{\tau}{4} (m_{i-1}^n + m_{i+1}^n) f_0 + m_i^0 F_n + \tilde{G}_i^n, \quad i \in [0, K], \\ m_i^0 = m_0(x_i), \quad 0 \leq i \leq I. \end{cases} \quad (2.11)$$

Область определения решения на каждом шаге n по времени будет расширяться, в соответствии с уравнением (2.11), на h вправо и на $-h$ влево, рис.2.2, и на каждом шаге получаются два новых крайних элемента: m_{0-n}^n и m_{K+n}^n . Это приводит к необходимости хранить постоянно растущий объем инфор-

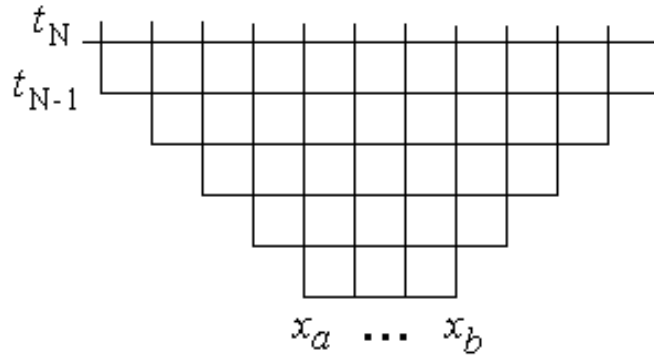


Рис.2.2. Расширение массива данных m_i^N с ростом N в случае

неограниченной области, $m_i^0 \in [x_a, x_b]$

мации, что существенно увеличивает время вычислений по сравнению с задачей с ограничениями. Для обсчета n -го шага по времени требуется хранение и обработка порядка $n(n+K+1)$ элементов, для всей задачи сложность решения имеет порядок $O(\sum_{n=1}^N (n^2 + nK))$.

Для определения m_i^N используется массив значений m_i^n ($0 \leq n \leq N-1$) размерности $(K+1+2N) \times (N)$. Причем, в силу постепенного расширения области, $m_i^n = 0$ при $i < -n$ и $i > K+n$. Обозначим

$$A_n = \begin{pmatrix} 1 & d & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ d & 1 & d & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & d & 1 & d & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & d \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & d & 1 \end{pmatrix}_{(2n+K+1) \times (2n+K+1)},$$

$$\bar{m}^n = \begin{pmatrix} m_{-n}^n \\ m_{-n+1}^n \\ \dots \\ m_{K+n}^n \\ m_{K+1+n}^n \end{pmatrix}, \quad \bar{b}^n = \begin{pmatrix} b_{-n}^n \\ b_{-n+1}^n \\ \dots \\ b_{K+n}^n \\ b_{K+1+n}^n \end{pmatrix},$$

$$d = -\frac{\tau^2}{4} f_0,$$

$$b_i^n = \frac{\tau}{2} \sum_{s=1}^{n-1} (m_{i-1}^s + m_{i+1}^s) f_{n-s} + \frac{\tau}{4} (m_{i-1}^0 + m_{i+1}^0) f_n + m_i^0 F_n + \tilde{G}_i^n.$$

Тогда начально-краевая задача для этого случая примет вид:

$$\begin{cases} A_n \bar{m}^n = \bar{b}^n, \\ m_i^n = 0 \text{ при } i < -n, \quad i > K+n. \end{cases}$$

Для численной задачи (2.11) имеет место такая же оценка сходимости, как для задачи (2.2), доказательство аналогично доказательству теоремы 2.6. Формулы для решения методом прогонки для последовательного определения $\bar{m}^1, \bar{m}^2, \dots, \bar{m}^N$, таковы:

$$\begin{cases} C_{-n} = -d, & \varphi_{-n} = -\bar{b}_{-n}^n \\ C_i = \frac{-d}{1+dC_{i-1}}, & \varphi_i = \frac{b_i^n - d\varphi_{i-1}}{1+dC_{i-1}}, \quad i = -n+1, \dots, K+n, \\ m_{K+n+1}^n = \frac{b_{K+n+1}^n - d\varphi_{K+n}}{1+dC_{K+n}} \\ m_i^n = C_i m_{i+1}^n + \varphi_i, \quad i = K+n-1, \dots, -n, \\ m_i^n = 0 \text{ при } i < -n, \quad i > K+n. \end{cases}$$

Замечание 2.8. Если $g(x,t)$ – сток, то в случае, если какое-либо m_i^s получается отрицательным значением, переопределяем его в соответствии с (1.38) как $m_i^s = 0$.

Графики фундаментального решения задачи (2.2) при $g(x,t)=0$, $m_0(x) = \delta(x)$ (общая масса $M=1$ в начальный момент времени сосредоточена в узле $x=0$) приведены на рис.2.3-2.5 для различных показателей α . Концентрация стремится к выравниванию с ростом t , причем в случае неограниченной области субдиффузии она стремится к нулю, а на замкнутом интервале $[x_a; x_b]$ к $\frac{M}{x_b - x_a}$. В зависимости от показателя α меняется скорость выравнивания.

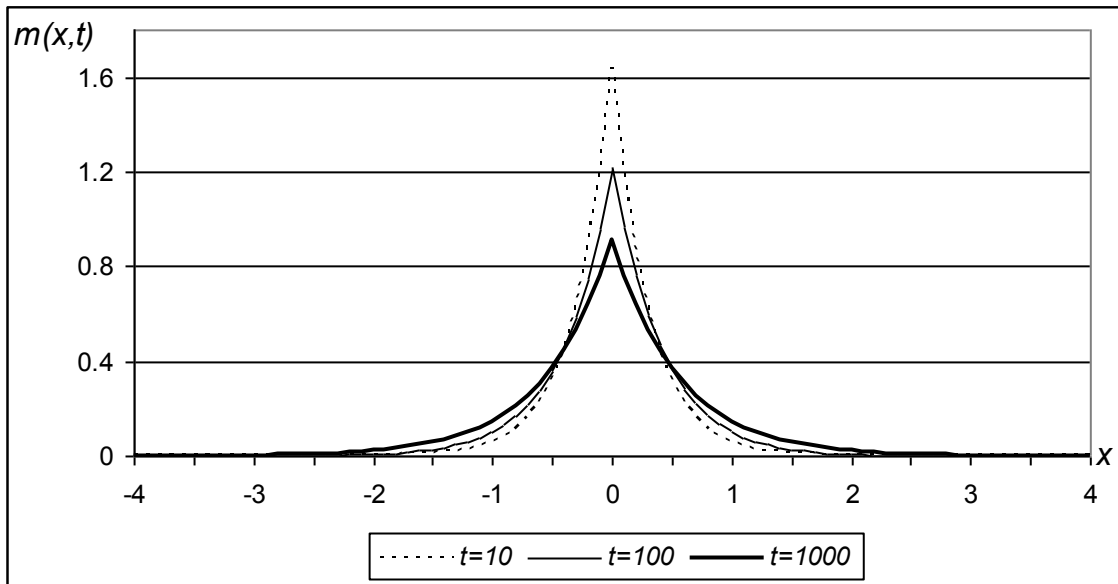


Рис.2.3. Фундаментальное решение $m(x,t)$ задачи (2.2) в области $[-4;4]$

при $t_1=10, t_2=100, t_3=1000, m_0(x) = \delta(x), D_\alpha=0.1, \alpha=0.25, h=0.01$

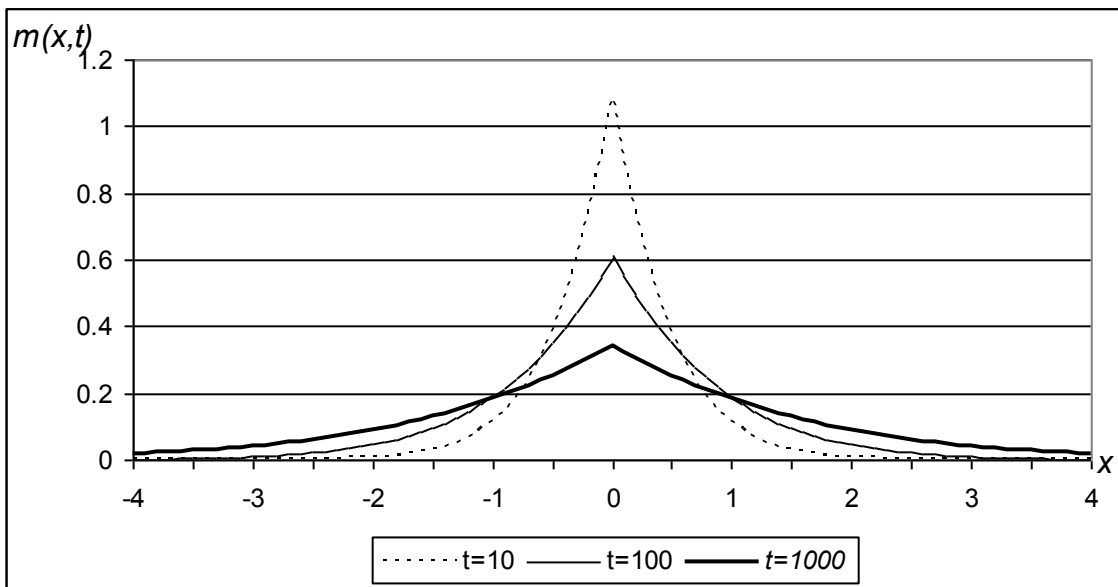


Рис.2.4. Фундаментальное решение $m(x,t)$ задачи (2.2) в области $[-4;4]$

для $t_1=10, t_2=100, t_3=1000, m_0(x) = \delta(x), D_\alpha=0.1, \alpha=0.5, h=0.01$

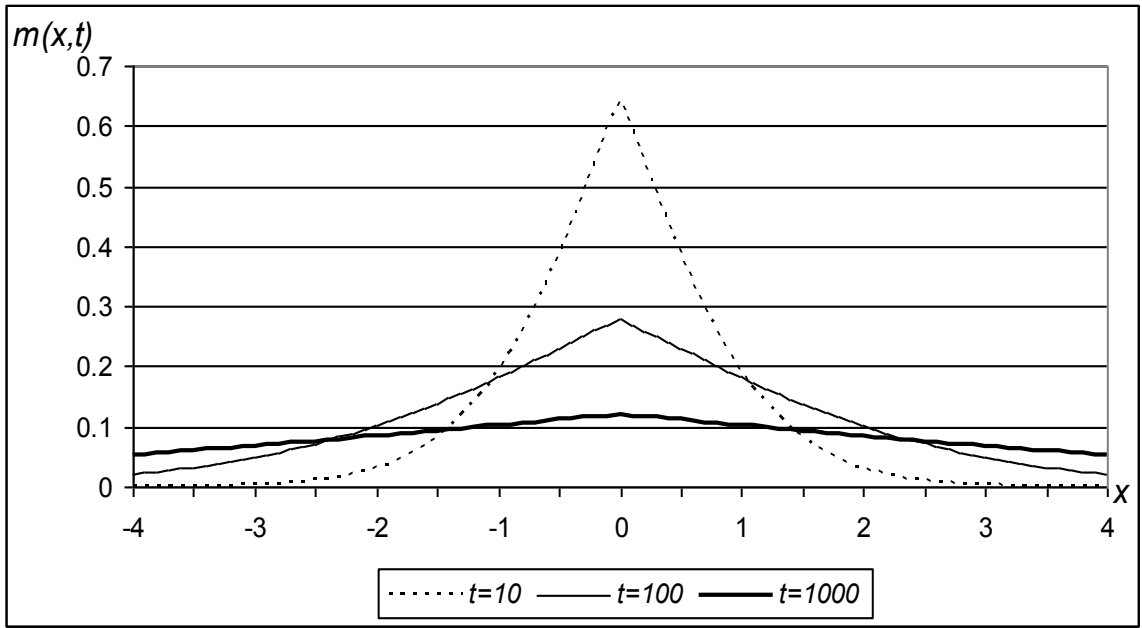


Рис.2.5. Фундаментальное решение $m(x,t)$ задачи (2.2) в области $[-4;4]$

для $t_1=10$, $t_2=100$, $t_3=1000$, $m_0(x) = \delta(x)$, $D_\alpha=0.1$, $\alpha=0.75$, $h=0.01$

2.2. Численное решение интегроразностного уравнения субдиффузии в R^2

В области $\Omega \in R^2$, $\bar{x}=(x, y)$, введем сетку $\bar{\omega} = \bar{\omega}_{\Delta t}^t \times \bar{\omega}_h^x \times \bar{\omega}_h^y$, где

$$\bar{\omega}_h^x = \{x_i = x_a + i\Delta x; \quad i = 0, \dots, I; \quad I\Delta x = x_b - x_a\}$$

$$\bar{\omega}_h^y = \{y_j = y_a + j\Delta y; \quad j = 0, \dots, J; \quad J\Delta y = y_b - y_a\}$$

$$\bar{\omega}_h^t = \{t_n = n\tau; \quad n = 0, \dots, N; \quad \tau N = T\}$$

Далее положим $\Delta x = \Delta y = h$. На сетке $\bar{\omega}$ зададим сеточные функции $u_{i,j}^n = u(x_i, y_j, t_n)$. В пространстве сеточных функций U_h определим сеточные нормы:

$$\|u^n\|_{U_h} = \max_{\substack{0 \leq i \leq I, \\ 0 \leq j \leq J}} |u_{i,j}^n|, \quad \|u_h\|_{U_h} = \max_{0 \leq n \leq N} \|u^n\|_{U_h}.$$

Построим численное решение для уравнения субдиффузии в R^2 с правой частью $\tilde{G}(x, y, t)$, $\tilde{G}(x, y, t) = \int_0^t g(\bar{x}, t-t') F(t') dt'$, где $g(\bar{x}, t)$ – источник.

Поставим начально-краевую задачу для уравнения (1.24) в R^2 с условием не пересечения границ: отражение от всех границ и углов области $\Omega = \{x \in [x_a, x_b], y \in [y_a, y_b], t \in [0, T]\}$:

$$\left\{ \begin{array}{l} m(x_a, y, t) = \frac{1}{4} \int_0^t (m(x_a + h, y, t - t') + m(x_a, y, t - t') + m(x_a, y + h, t - t') + \\ \quad + m(x_a, y - h, t - t')) f(t') dt' + m_0(x_a, y) F(t) + \tilde{G}(x_a, y, t); \\ m(x_b, y, t) = \frac{1}{4} \int_0^t (m(x_b - h, y, t - t') + m(x_b, y, t - t') + m(x_b, y + h, t - t') + \\ \quad + m(x_b, y - h, t - t')) f(t') dt' + m_0(x_a, y) F(t) + \tilde{G}(x_b, y, t); \\ m(x, y_a, t) = \frac{1}{4} \int_0^t (m(x, y_a + h, t - t') + m(x, y_a, t - t') + m(x + h, y_a, t - t') + \\ \quad + m(x - h, y_a, t - t')) f(t') dt' + m_0(x, y_a) F(t) + \tilde{G}(x, y_a, t); \\ m(x, y_b, t) = \frac{1}{4} \int_0^t (m(x, y_b - h, t - t') + m(x, y_b, t - t') + m(x + h, y_b, t - t') + \\ \quad + m(x - h, y_b, t - t')) f(t') dt' + m_0(x, y_b) F(t) + \tilde{G}(x, y_b, t); \\ m(x_a, y_a, t) = \frac{1}{4} \int_0^t ((m(x_a + h, y_a, t - t') + m(x_a, y_a + h, t - t') + \\ \quad + 2m(x_a, y_a, t)) f(t') dt' + m_0(x_a, y_a) F(t) + \tilde{G}(x_a, y_a, t); \\ m(x_a, y_b, t) = \frac{1}{4} \int_0^t (m(x_a + h, y_b, t - t') + m(x_a, y_b - h, t - t') + \\ \quad + 2m(x_a, y_b, t)) f(t') dt' + m_0(x_a, y_b) F(t) + \tilde{G}(x_a, y_b, t); \\ m(x_b, y_a, t) = \frac{1}{4} \int_0^t (m(x_b - h, y_a, t - t') + m(x_b, y_a + h, t - t') + \\ \quad + 2m(x_b, y_a, t)) f(t') dt' + m_0(x_b, y_a) F(t) + \tilde{G}(x_b, y_a, t); \\ m(x_b, y_b, t) = \frac{1}{4} \int_0^t ((m(x_b - h, y_b, t - t') + m(x_b, y_b - h, t - t') + \\ \quad + m(x_b, y_b, t)) f(t') dt' + p_0(x_b, y_b) F(t) + \tilde{G}(x_b, y_b, t). \end{array} \right. \quad (2.12)$$

Построим численную схему для аппроксимации уравнения (1.24) в R^2 , используя квадратурную формулу трапеций. Начально-краевая задача примет вид

$$\left\{ \begin{array}{l}
((2d+1)m_{0,0}^n + d m_{1,0}^n) + dm_{0,1}^n = b_{0,0}^{n-1}, \\
(d m_{i-1,0}^n + (d+1)m_{i,0}^n + dm_{i+1,0}^n) + dm_{i,1}^n = b_{i,0}^{n-1}, \quad 1 \leq i \leq I-1, \\
((2d+1)m_{I,0}^n + dm_{I-1,0}^n) + dm_{I,1}^n = b_{I,0}^{n-1}, \\
dm_{0,j-1}^n + ((d+1)m_{0,j}^n + dm_{1,j}^n) + dm_{0,j+1}^n = b_{0,j}^{n-1}, \quad 1 \leq j \leq J-1, \\
dm_{i,j-1}^n + (dm_{i-1,j}^n + m_{i,j}^n + dm_{i+1,j}^n) + \\
\quad + dm_{i,j+1}^n = b_{i,j}^{n-1}, \quad 1 \leq i \leq I-1, \quad 1 \leq j \leq J-1, \\
dm_{I,j-1}^n + (dm_{I-1,j}^n + (d+1)m_{I,j}^n) = b_{I,j}^{n-1}, \quad 1 \leq j \leq J-1, \\
dm_{0,J-1}^n + ((2d+1)m_{0,J}^n + dm_{1,J}^n) = b_{0,J}^{n-1}, \\
dm_{i,J-1}^n + (dm_{i-1,J}^n + m_{i,J}^n + dm_{i+1,J}^n) = b_{i,J}^{n-1}, \quad 1 \leq i \leq I-1, \\
dm_{I,J-1}^n + (dm_{I-1,J}^n + (2d+1)m_{I,J}^n) = b_{I,J}^{n-1}, \\
m_{i,j}^0 = m_0(x_i, y_j), \quad 0 \leq i \leq I, \quad 0 \leq j \leq J
\end{array} \right. \quad (2.13)$$

где

$$\left\{ \begin{array}{l}
b_{0,0}^n = \frac{1}{4} \sum_{s=1}^n (2m_{0,0}^s + m_{1,0}^s + m_{0,1}^s) dF_{n-s} + \\
\quad + \frac{dF_n}{8} (2m_{0,0}^0 + m_{1,0}^0 + m_{0,1}^0) + m_{0,0}^0 F_n + \check{G}_{0,0}^n, \\
b_{i,0}^n = \frac{1}{4} \sum_{s=1}^n (m_{i-1,0}^s + m_{i+1,0}^s + m_{i,0}^s + m_{i,1}^s) dF_{n-s} + \\
\quad + \frac{dF_n}{8} (m_{i-1,0}^0 + m_{i+1,0}^0 + m_{i,0}^0 + m_{i,1}^0) + m_{i,0}^0 F_n + \check{G}_{i,0}^n, \\
b_{I,0}^n = \frac{1}{4} \sum_{s=1}^n (2m_{I,0}^s + m_{I-1,0}^s + m_{I,1}^s) dF_{n-s} + \\
\quad + \frac{dF_n}{8} (2m_{I,0}^0 + m_{I-1,0}^0 + m_{I,1}^0) + m_{I,0}^0 F_n + \check{G}_{I,0}^n,
\end{array} \right.$$

~~~~~

$$\begin{aligned}
b_{0,j}^n &= \frac{1}{4} \sum_{s=1}^n (m_{0,j}^s + m_{1,j}^s + m_{0,j-1}^s + m_{0,j+1}^s) dF_{n-s} + \\
&\quad + \frac{dF_n}{8} (m_{0,j}^0 + m_{1,j}^0 + m_{0,j-1}^0 + m_{0,j+1}^0) + m_{0,j}^0 F_n + \tilde{G}_{0,j}^n, \\
b_{i,j}^n &= \frac{1}{4} \sum_{s=1}^n (m_{i-1,j}^s + m_{i+1,j}^s + m_{i,j-1}^s + m_{i,j+1}^s) dF_{n-s} + \\
&\quad + \frac{dF_n}{8} (m_{i-1,j}^0 + m_{i+1,j}^0 + m_{i,j-1}^0 + m_{i,j+1}^0) + m_{i,j}^0 F_n + \tilde{G}_{i,j}^n, \\
b_{I,j}^n &= \frac{1}{4} \sum_{s=1}^n (m_{I,j}^s + m_{I-1,j}^s + m_{I,j-1}^s + m_{I,j+1}^s) dF_{n-s} + \\
&\quad + \frac{dF_n}{8} (m_{I,j}^0 + m_{I-1,j}^0 + m_{I,j-1}^0 + m_{I,j+1}^0) + m_{I,j}^0 F_n + \tilde{G}_{I,j}^n, \\
b_{0,J}^n &= \frac{1}{4} \sum_{s=1}^n (2m_{0,J}^s + m_{1,J}^s + m_{0,J-1}^s) dF_{n-s} + \\
&\quad + \frac{dF_n}{8} (2m_{0,J}^0 + m_{1,J}^0 + m_{0,J-1}^0) + m_{0,J}^0 F_n + \tilde{G}_{0,J}^n, \\
b_{i,J}^n &= \frac{1}{4} \sum_{s=1}^n (m_{i-1,J}^s + m_{i+1,J}^s + m_{i,J}^s + m_{i,J-1}^s) dF_{n-s} + \\
&\quad + \frac{dF_n}{8} (m_{i-1,J}^0 + m_{i+1,J}^0 + m_{i,J}^0 + m_{i,J-1}^0) + m_{i,J}^0 F_n + \tilde{G}_{i,J}^n, \\
b_{I,J}^n &= \frac{1}{4} \sum_{s=1}^n (2m_{I,J}^s + m_{I-1,J}^s + m_{I,J-1}^s) dF_{n-s} + \\
&\quad + \frac{dF_n}{8} (2m_{I,J}^0 + m_{I-1,J}^0 + m_{I,J-1}^0) + m_{I,J}^0 F_n + \tilde{G}_{I,J}^n, \\
d &= -\frac{\tau}{8} f_0.
\end{aligned} \tag{2.14}$$

**Теорема 2.9.** Внесение в численную задачу (2.13) возмущения порядка

$\varepsilon$  приводит к возмущению решения порядка  $|\varepsilon| \frac{4}{f_0 \tau} e^{\frac{f_0 T}{2}}$ .



**Теорема 2.10** Задача (2.13) аппроксимирует задачу (1.24) в  $R^2$  с краевыми условиями (2.12) на ее решении  $(m)$  с порядком  $\tau^2$ , причем имеет место сходимость:

$$\|m_h - (m)_h\|_{u_h} \leq \frac{4}{f_0} e^{\frac{f_0 T}{2}} \tau.$$

Доказательство теорем 2.9 и 2.10 проводится аналогично доказательству теорем 2.5 и 2.6 в  $R^1$ .

Решим систему (2.13) методом матричной прогонки. Введем следующие обозначения:

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1+d & d & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ d & 1 & d & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & d & 1 & d & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & d \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & d & 1+d \end{pmatrix}_{(I+1) \times (I+1)}, \quad \bar{U}_j^n = \begin{pmatrix} m_{0,j}^n \\ m_{1,j}^n \\ \dots \\ m_{I,j}^n \end{pmatrix}, \quad \bar{B}_j^n = \begin{pmatrix} b_{0,j}^n \\ b_{1,j}^n \\ \dots \\ b_{I,j}^n \end{pmatrix},$$

$$A_2 = \begin{pmatrix} 1+2d & d & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ d & 1+d & d & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & d & 1+d & d & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d & 1+d & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1+d & d \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & d & 1+2d \end{pmatrix}_{(I+1) \times (I+1)},$$

тогда получим представление задачи (2.13) в виде

$$\begin{cases} A_2 \bar{U}_0^n + d \bar{U}_1^n = \bar{B}_0^{n-1}, \\ d \bar{U}_{j-1}^n + A_1 \bar{U}_j^n + d \bar{U}_{j+1}^n = \bar{B}_j^{n-1}, \quad 1 \leq j \leq J-1 \\ d \bar{U}_{J-1}^n + A_2 \bar{U}_J^n = \bar{B}_J^{n-1}, \\ m_{i,j}^0 = m_0(x_i, y_j), \quad 0 \leq i \leq I, \quad 0 \leq j \leq J. \end{cases} \quad (2.15)$$

Аналогично тому, как выведены формулы прогонки в одномерном случае, для задачи (2.15) выводим коэффициенты прогонки:

$$\begin{cases} C_0 = -dA_2^{-1}, \\ \bar{\varphi}_0 = -A_2^{-1}\bar{B}_0^{n-1}, \\ C_j = -d(dC_{j-1} + A_1)^{-1}, \quad j = 1, \dots, J-1, \\ \bar{\varphi}_j = (dC_{j-1} + A_1)^{-1}(\bar{B}_{j-1}^{n-1} - d\bar{\varphi}_{j-1}), \quad j = 1, \dots, J-1. \end{cases}$$

И формулы для решения  $\bar{U}_j^n$  примут вид:

$$\begin{cases} \bar{U}_J^n = (dC_{J-1} + A_2)^{-1} + \bar{B}_J^{n-1} - d\bar{\varphi}_{J-1} \\ \bar{U}_j^n = C_j \bar{U}_{j+1}^n + \bar{\varphi}_j, \quad j = J-1, \dots, 0. \end{cases}$$

Таким образом, получено точное решение задачи (2.13), но это решение не будет экономичным – на каждом шаге по времени нам придется обращаться  $2J$  матриц размерности  $I \times I$ , что вместе с вычислением правых частей  $b_{i,j}^n$  приводит к совокупной сложности порядка  $O(N^2 IJ/2 + N I^3 J/2)$ .

Задача (2.13) аппроксимирует интегральную задачу (1.30) с краевыми условиями (2.12) с погрешностью порядка  $\tau^2$ . Следовательно, использование вместо задачи (2.13) некоторой ее аппроксимации с погрешностью, не превосходящей  $\tau^2$ , не приведет к увеличению погрешности аппроксимации исходной задачи. Построим экономичную численную схему, аппроксимирующую (2.13) с порядком  $O(\tau^2)$  – схему расщепления:

$$\begin{cases} m_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = b_{i,j}^n - dL_x m_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - dL_y m_{i,j}^n; \\ m_{i,j}^{n+1} = m_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - dL_y (m_{i,j}^{n+1} - m_{i,j}^n); \\ m_{i,j}^0 = m_0(x_i, y_j), \quad 0 \leq i \leq I, \quad 0 \leq j \leq J; \end{cases} \quad (2.16)$$

где  $d$  и  $b_{i,j}^n$  определяются по формулам (2.14), и

$$L_x m_{i,j}^S = m_{i-1,j}^S + m_{i+1,j}^S, \quad L_y m_{i,j}^S = m_{i,j-1}^S + m_{i,j+1}^S.$$

Краевые условия задаются следующим образом:

$$\left\{ \begin{array}{l} m_{0,j}^{n+\frac{1}{2}} = b_{0,j}^n - dm_{0,j}^{n+\frac{1}{2}} - dm_{1,j}^{n+\frac{1}{2}} - dL_y m_{0,j}^n; \\ m_{0,j}^{n+1} = m_{0,j}^{n+\frac{1}{2}} - dL_y m_{0,j}^{n+1} + dL_y m_{0,j}^n; \\ m_{i,0}^{n+\frac{1}{2}} = b_{i,0}^n - dL_x m_{i,0}^{n+\frac{1}{2}} - dm_{i,0}^n - dm_{i,1}^n; \\ m_{i,0}^{n+1} = m_{i,0}^{n+\frac{1}{2}} - dm_{i,0}^{n+1} - dm_{i,1}^{n+1} + dm_{i,0}^n + dm_{i,1}^n; \\ m_{0,j}^{n+\frac{1}{2}} = b_{0,j}^n - dm_{0,j}^{n+\frac{1}{2}} - dm_{1,j}^{n+\frac{1}{2}} - dL_y m_{0,j}^n; \\ m_{0,j}^{n+1} = m_{0,j}^{n+\frac{1}{2}} - dL_y m_{0,j}^{n+1} + dL_y m_{0,j}^n; \\ m_{i,0}^{n+\frac{1}{2}} = b_{i,0}^n - dL_x m_{i,0}^{n+\frac{1}{2}} - dm_{i,0}^n - dm_{i,1}^n; \\ m_{i,0}^{n+1} = m_{i,0}^{n+\frac{1}{2}} - dm_{i,0}^{n+1} - dm_{i,1}^{n+1} + dm_{i,0}^n + dm_{i,1}^n; \\ m_{I,J}^{n+\frac{1}{2}} = b_{I,j}^n - dm_{I-1,J}^{n+\frac{1}{2}} - dm_{I,J}^{n+\frac{1}{2}} - dm_{I,J-1}^n - dm_{I,J}^n; \\ m_{I,J}^{n+1} = m_{I,J}^{n+\frac{1}{2}} - dm_{I,J-1}^{n+1} - dm_{I,J}^{n+1} + dm_{I,J-1}^n + dm_{I,J}^n; \\ m_{0,0}^{n+\frac{1}{2}} = b_{0,0}^n - dm_{0,0}^{n+\frac{1}{2}} - dm_{1,0}^{n+\frac{1}{2}} - dm_{0,0}^n - dm_{0,1}^n; \\ m_{0,0}^{n+1} = m_{0,0}^{n+\frac{1}{2}} - dm_{0,0}^{n+1} - dm_{0,1}^{n+1} + dm_{0,0}^n + dm_{0,1}^n; \\ m_{I,0}^{n+\frac{1}{2}} = b_{I,0}^n - dm_{I-1,0}^{n+\frac{1}{2}} - dm_{I,0}^{n+\frac{1}{2}} - dm_{I,0}^n - dm_{I,1}^n; \end{array} \right. \quad (2.17)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} m_{I,0}^{n+1} = m_{I,0}^{n+\frac{1}{2}} - dm_{I,0}^{n+1} - dm_{I,1}^{n+1} + dm_{I,0}^n + dm_{I,1}^n; \\ m_{0,J}^{n+\frac{1}{2}} = b_{0,J}^n - dm_{0,J}^{n+\frac{1}{2}} - dm_{1,J}^{n+\frac{1}{2}} - dm_{0,J-1}^n - dm_{0,J}^n; \\ m_{0,J}^{n+1} = m_{0,J}^{n+\frac{1}{2}} - dm_{0,J-1}^{n+1} - dm_{0,J}^{n+1} + dm_{0,J-1}^n + dm_{0,J}^n. \end{array} \right.$$

**Лемма 2.11.** Численная схема (2.16-2.17) аппроксимирует (2.13) на ее решении с порядком  $\tau^2$ .

Доказательство.

Покажем аппроксимацию (2.16), аппроксимация краевых условий (2.17) доказывается аналогично. Запишем систему (2.16) в виде

$$\left\{ \begin{array}{l} (E + dL_x)m_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = b_{i,j}^n - dL_y m_{i,j}^n, \\ (E + dL_y)m_{i,j}^{n+1} - dL_y m_{i,j}^n = m_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}, \end{array} \right.$$

тогда, подставляя  $m_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}$  из второго уравнения в первое, получим:

$$(E + dL_x)(E + dL_y)m_{i,j}^{n+1} - d(E + dL_x)L_y m_{i,j}^n = b_{i,j}^n - dL_y m_{i,j}^n,$$

$$(E + dL_x + dL_y)m_{i,j}^{n+1} + d^2 L_x L_y m_{i,j}^{n+1} - dL_y m_{i,j}^n - d^2 L_x L_y m_{i,j}^n = b_{i,j}^n - dL_y m_{i,j}^n,$$

$$(E + dL_x + dL_y)m_{i,j}^{n+1} = b_{i,j}^n + d^2 L_x L_y (m_{i,j}^{n+1} - m_{i,j}^n),$$

$$(E + dL_x + dL_y)m_{i,j}^{n+1} = b_{i,j}^n + O(\tau^2).$$

Последнее уравнение аппроксимирует (2.13) с порядком  $\tau^2$ .

Лемма 2.11 доказана.

**Теорема 2.12** Решение задачи (2.16-2.17) сходится к решению задачи (1.30) с краевыми условиями (2.12), причем  $\|m_h - (m)_h\|_{u_h} \leq C\tau$ .

Доказательство.

Сначала оценим погрешность решения, полученную в результате внесения в схему погрешности  $\varepsilon^n = (\varepsilon_{i,j}^n)_{(I+1) \times (J+1)}$ ,  $\|\varepsilon_h\| = \max_{0 \leq n \leq N} |\varepsilon^n|$ .

Рассмотрим возмущенную схему:

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - dL_y u_{i,j}^{n+1} + dL_y u_{i,j}^n + \varepsilon_{i,j}^n,$$

где  $u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}$  – решение вспомогательной задачи

$$u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = b_{i,j}^n - dL_x u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - dL_y u_{i,j}^n.$$

Вычитая из возмущенной схемы исходную, получим задачу для погрешности  $v_{i,j}^n$  ( $v_{i,j}^n = u_{i,j}^n - m_{i,j}^n$ ) на слое  $n$ :

$$\begin{cases} v_{i,j}^{n+1} = v_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - dL_y v_{i,j}^{n+1} + dL_y v_{i,j}^n + \varepsilon_{i,j}^n, \\ v_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = b_{i,j}^n - dL_x v_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - dL_y v_{i,j}^n, \\ v_{i,j}^0 = \varepsilon_{i,j}^0. \end{cases}$$

Тогда для всех  $n$  справедлива оценка:

$$1) \left| v_{i,j}^{n+1} \right| \leq \left| v_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} \right| + 2d \max_{i,j} |v_{i,j}^{n+1}| + 2d \max_{i,j} |v_{i,j}^n| + \max_{i,j} |\varepsilon_{i,j}^n|,$$

$$\|v^{n+1}\| \leq \frac{1}{1-2d} \left( \left\| v^{n+\frac{1}{2}} \right\| + 2d \|v^n\| + \|\varepsilon^n\| \right);$$

$$2) \left| v_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} \right| \leq |b_{i,j}^n| + 2d \max_{i,j} \left| v_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} \right| + 2d \max_{i,j} |v_{i,j}^n|,$$

$$\left\| v^{n+\frac{1}{2}} \right\| \leq \frac{1}{1-2d} \left( \|b^n\| + 2d \|v^n\| \right) \leq \frac{1+2d}{1-2d} \|v^n\|.$$

Тогда

$$\|v^{n+1}\| \leq \frac{1}{1-2d} \left( \left( \frac{1+2d}{1-2d} + 2d \right) \|v^n\| + \|\varepsilon^n\| \right).$$

Обозначим  $K = \frac{1+2d}{1-2d} + 2d$ , тогда

$$\begin{aligned} \|v^{n+1}\| &\leq \frac{1}{1-2d} \left( K \frac{1}{1-2d} \left( K \|v^{n-1}\| + \|\varepsilon^{n-1}\| \right) + \|\varepsilon^n\| \right) \leq \dots \leq \\ &\leq \left( \frac{K}{1-2d} \right)^{n+1} \|\varepsilon^0\| + \frac{1}{1-2d} \left( \|\varepsilon^n\| + \left( \frac{K}{1-2d} \right) \|\varepsilon^{n-1}\| + \dots + \left( \frac{K}{1-2d} \right)^n \|\varepsilon^0\| \right) \leq \\ &\leq \max_{0 \leq s \leq n} \|\varepsilon^s\| \frac{1}{1-2d} \left( 1 + \left( \frac{K}{1-2d} \right) + \dots + \left( \frac{K}{1-2d} \right)^{n+1} \right) \leq \\ &\leq \max_{0 \leq s \leq n} \|\varepsilon^s\| \frac{1}{1-2d} \left( \left( \frac{K}{1-2d} \right)^{n+2} - 1 \right) \cdot \frac{1}{\left( \frac{K}{1-2d} - 1 \right)} \leq \\ &\leq \frac{1}{f_0 \tau} (e^{f_0 T} - 1) \max_{0 \leq s \leq n} \|\varepsilon^s\|. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\|v_h\|_{u_h} = \max_{0 \leq n \leq N} |v^n| \leq \frac{1}{f_0 \tau} (e^{f_0 T} - 1) \max_{0 \leq n \leq N} \|\varepsilon^n\| = \frac{1}{f_0 \tau} (e^{f_0 T} - 1) \|\varepsilon_h\|.$$

Так как, согласно лемме 2.11, задача (2.16-2.17) аппроксимирует задачу (2.13) с порядком  $\tau^2$ , а по теореме 2.10 задача (2.13) аппроксимирует задачу (1.30) с краевыми условиями (2.12) с таким же порядком, то (2.16-2.17) аппроксимирует (1.30) с порядком  $\tau^2$ , и справедливо:

$$\|m_h - (m)_h\|_{u_h} \leq \tau^2 \frac{1}{f_0 \tau} (e^{f_0 T} - 1) = C \tau.$$

Теорема 2.12. доказана.

**Утверждение 2.13.** Численная схема (2.16-2.17) является экономичной.

Действительно, для перехода со слоя  $n$  на слой  $(n+1)$  сначала определя-

ем из первого уравнения системы промежуточный слой значений  $m_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}$  прогонкой по переменной  $x$ , затем из второго уравнения находим  $m_{i,j}^{n+1}$  прогонкой по  $y$ . В совокупности получаем порядка  $O(IJ)$  операций. Вычисление правой части  $b_{i,j}^n$  потребует дополнительно порядка  $O(nIJ)$  операций. Итого сложность задачи для определения  $m_{i,j}^N$  имеет порядок  $O((N+N^2)IJ/2)$ .

Коэффициенты прогонки задаются формулами:

1) определение  $m_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}$  прогонкой по  $i$  (по всем  $j=0, \dots, J$ ):

$$\begin{cases} C_{X,0} = \frac{-d}{1+d}, & \varphi_{X,0} = -C_{X,0} \frac{1}{d} (b_{0,j}^n - dL_y m_{0,j}^n) \\ C_{X,i} = \frac{-d}{1+dC_{X,i-1}}, & \varphi_{X,i} = C_{X,i} \left( -\frac{1}{d} (b_{i,j}^n - dL_y m_{i,j}^n) + \varphi_{X,i-1} \right) \end{cases} \quad (2.18)$$

$$\begin{cases} m_{I,j}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{(b_{I,j}^n - dL_y m_{I,j}^n) - d\varphi_{X,I-1}}{1+d(1+C_{X,I-1})} \\ m_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = C_{X,i} m_{i+1,j}^n + \varphi_{X,i}, \quad i = I-1, \dots, 0 \end{cases} \quad (2.19)$$

2) определение  $m_{i,j}^{n+1}$  прогонкой по  $j$  (по всем  $i=0, \dots, I$ ):

$$\begin{cases} C_{Y,0} = \frac{-d}{1+d}, \\ \varphi_{Y,0} = -C_{Y,0} \frac{1}{d} (m_{i,0}^{n+\frac{1}{2}} + dL_y m_{i,0}^n), \\ C_{Y,j} = \frac{-d}{1+dC_{Y,j-1}}, \\ \varphi_{Y,j} = C_{Y,j} \left( -\frac{1}{d} (m_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + dL_y m_{i,j}^n) + \varphi_{Y,j-1} \right), \end{cases} \quad (2.20)$$

$$\begin{cases} m_{i,J}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{(b_{i,J}^n + dL_y m_{i,J}^n) - d\varphi_{Y,J-1}}{1 + d(1 + C_{Y,J-1})} \\ m_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = C_{Y,j} m_{i+1,j}^n + \varphi_{Y,j}, \quad j = J-1, \dots, 0 \end{cases} \quad (2.21)$$

Графики фундаментального решения  $m(x,y,t)$  задачи (2.16-2.17) при  $g(x,y,t)=0$ ,  $m_0(x) = \delta(x)$  приведены на рис.2.6-2.8 для различных показателей  $\alpha$ . Выравнивание концентрации происходит с разной скоростью в зависимости от  $\alpha$ .

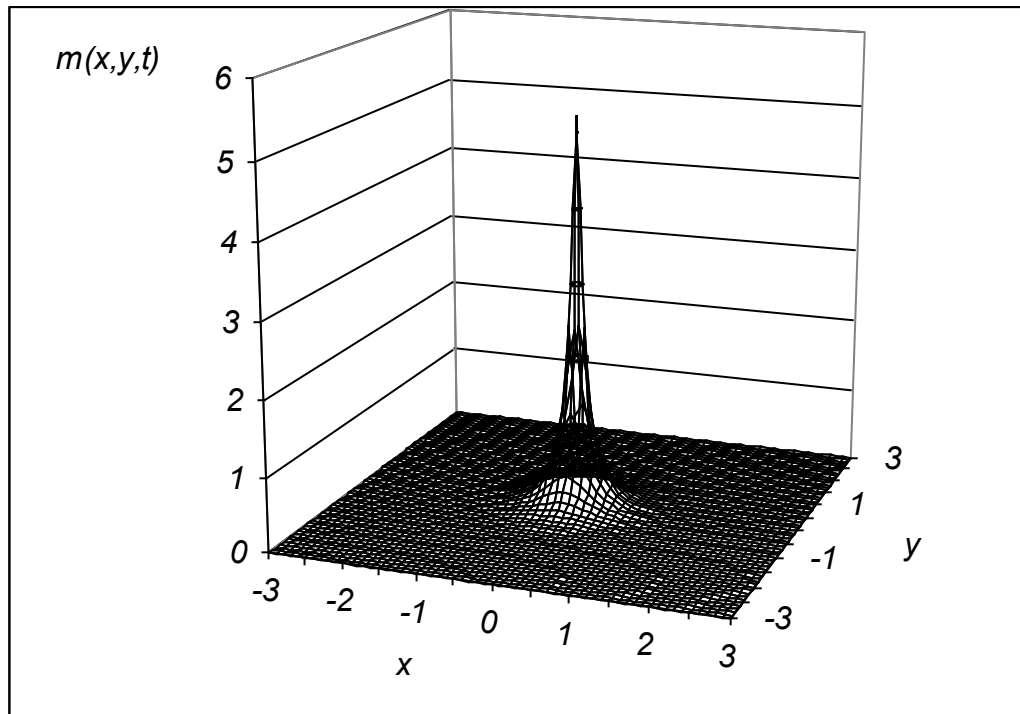


Рис.2.6. Фундаментальное решение  $m(x,y,t)$  задачи (2.16-2.17) в  $R^2$ , в области  $[-3;3] \times [-3;3]$ , для  $t=100$ ,  $m_0(x,y) = \delta(x,y)$ ,  $h=0.01$ ,  $D_\alpha=0.1$ ,  $\alpha=0.25$



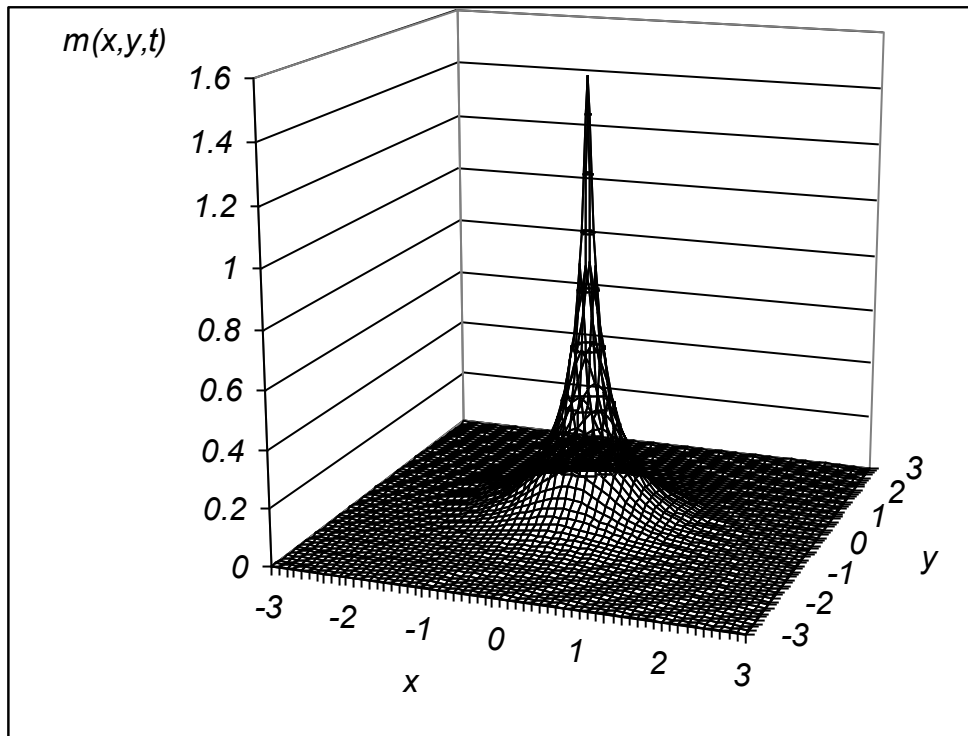


Рис.2.7. Фундаментальное решение  $m(x,y,t)$  задачи (2.16-2.17) в  $R^2$ ,  
в области  $[-3;3] \times [-3;3]$ , для  $t=100$ ,  $m_0(x,y) = \delta(x,y)$ ,  $h=0.01$ ,  $D_\alpha=0.1$ ,  $\alpha=0.5$

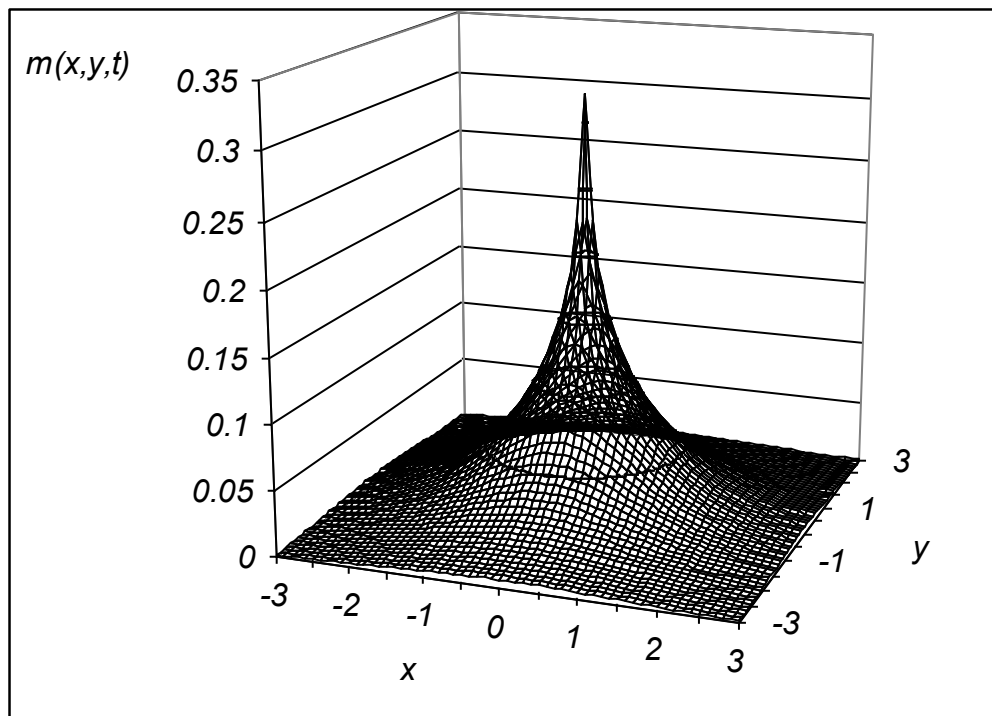


Рис.2.8. Фундаментальное решение  $m(x,y,t)$  задачи (2.16-2.17) в  $R^2$ ,  
в области  $[-3;3] \times [-3;3]$ , для  $t=100$ ,  $m_0(x,y) = \delta(x,y)$ ,  $h=0.01$ ,  $D_\alpha=0.1$ ,  $\alpha=0.75$

### 2.3. Численное решение интегроразностного уравнения субдиффузии в $R^3$

Для процесса субдиффузии в  $R^3$ ,  $\bar{x}=(x,y,z)$ , с источником  $G(\bar{x},t)$  поставим краевую задачу для уравнения (1.24) в  $R^3$  в области  $\Omega=\{x\in[x_a, x_b], y\in[y_a, y_b], z\in[z_a, z_b], t\in[0,T]\}$  с условиями отражения от всех граней, границ и углов. Краевые условия выписываются аналогично условиям (2.12) в  $R^2$ .

В рассматриваемой области  $\Omega$  введем сетки

$$\bar{\omega} = \bar{\omega}_{\Delta t}^t \times \bar{\omega}_h^x \times \bar{\omega}_h^y \times \bar{\omega}_h^z;$$

$$\bar{\omega}_h^x = \{x_i = x_a + i\Delta x; \quad i = 0, \dots, I; \quad I\Delta x = x_b - x_a\};$$

$$\bar{\omega}_h^y = \{y_j = y_a + j\Delta y; \quad j = 0, \dots, J; \quad J\Delta y = y_b - y_a\};$$

$$\bar{\omega}_h^z = \{z_k = z_a + k\Delta z; \quad k = 0, \dots, K; \quad K\Delta z = z_b - z_a\};$$

$$\bar{\omega}_h^t = \{t_n = n\tau; \quad n = 0, \dots, N; \quad \tau N = T\}.$$

Положим  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = h$ . На сетке  $\bar{\omega}$  зададим сеточные функции  $u_{i,j,k}^n = u(x_i, y_j, z_k, t_n)$ . В пространстве сеточных функций  $U_h$  определим сеточные нормы:

$$\|u^n\| = \max_{\substack{0 \leq i \leq I, \\ 0 \leq j \leq J, \\ 0 \leq k \leq K}} |u_{i,j,k}^n|_{U_h}, \quad \|u_h\|_{U_h} = \max_{0 \leq n \leq N} \|u^n\|_{U_h}.$$

Построим численную аппроксимацию уравнения (1.24) в  $R^3$ , используя квадратурную формулу трапеций:

$$\begin{aligned} m_{i,j,k}^n = & \frac{\tau}{6} \sum_{s=1}^{n-1} (m_{i-1,j,k}^s + m_{i+1,j,k}^s + m_{i,j-1,k}^s + m_{i,j+1,k}^s + m_{i,j,k-1}^s + \\ & + m_{i,j,k+1}^s) f_{n-s} + \frac{\tau}{12} (m_{i-1,j,k}^0 + m_{i+1,j,k}^0 + m_{i,j-1,k}^0 + m_{i,j+1,k}^0 + \\ & + m_{i,j,k-1}^0 + m_{i,j,k+1}^0) f_n + \frac{\tau}{12} (m_{i-1,j,k}^n + m_{i+1,j,k}^n + m_{i,j-1,k}^n + \\ & + m_{i,j+1,k}^n + m_{i,j,k-1}^n + m_{i,j,k+1}^n) f_0 + m_{i,j,k}^0 F_n + g_{i,j,k}^n \end{aligned} \quad (2.22)$$

Используя матрицы  $A_1$  и  $A_2$ , введенные в п.2.2, а также обозначения

$$A_3 = \begin{pmatrix} 1+3d & d & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ d & 1+2d & d & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & d & 1+2d & d & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d & 1+2d & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1+2d & d \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & d & 1+3d \end{pmatrix}_{(I+1) \times (I+1)},$$

$$d = -\frac{\tau}{12} f_0, \quad \bar{U}_{j,k}^n = \begin{pmatrix} m_{0,j,k}^n \\ m_{1,j,k}^n \\ \dots \\ m_{I,j,k}^n \end{pmatrix}, \quad \bar{B}_{j,k}^n = \begin{pmatrix} b_{0,j,k}^n \\ b_{1,j,k}^n \\ \dots \\ b_{I,j,k}^n \end{pmatrix}, \quad (2.23)$$

где

$$b_{i,j,k}^n = \frac{\tau}{6} \sum_{s=1}^n \left( \sum_{\substack{\text{по всем} \\ \text{соседним} \\ \text{узлам} \\ (i_1, j_1, k_1)}} m_{i_1, j_1, k_1}^s \right) f_{n-s} + \frac{\tau}{12} \left( \sum_{\substack{\text{по всем} \\ \text{соседним} \\ \text{узлам} \\ (i_1, j_1, k_1)}} m_{i_1, j_1, k_1}^s \right) f_n + \\ + m_{i,j,k}^0 F_n + \tilde{G}_{i,j,k}^n, \quad (2.24)$$

запишем начально-краевую задачу для уравнения (2.22) в виде:

$$\left\{ \begin{array}{l}
A_3 \bar{U}_{0,0}^n + d\bar{U}_{0,1}^n + d\bar{U}_{1,0}^n = \bar{b}_{0,0}^{n-1}, \\
A_2 \bar{U}_{j,0}^n + d\bar{U}_{j-1,0}^n + d\bar{U}_{j+1,0}^n + d\bar{U}_{j,1}^n = \bar{b}_{j,0}^{n-1}, \quad 1 \leq j \leq J-1, \\
A_3 \bar{U}_{J,0}^n + d\bar{U}_{J-1,0}^n + d\bar{U}_{J,1}^n = \bar{b}_{J,0}^{n-1}, \\
\\
A_2 \bar{U}_{0,k}^n + d\bar{U}_{0,k-1}^n + d\bar{U}_{0,k+1}^n + d\bar{U}_{1,k}^n = \bar{b}_{0,k}^{n-1}, \quad 1 \leq k \leq K-1, \\
A_1 \bar{U}_{j,k}^n + d\bar{U}_{j-1,k}^n + d\bar{U}_{j+1,k}^n + d\bar{U}_{j,k-1}^n + d\bar{U}_{j,k+1}^n = \bar{b}_{j,k}^{n-1}, \\
\hspace{15em} 1 \leq k \leq K-1, \quad 1 \leq j \leq J-1, \\
A_2 \bar{U}_{J,k}^n + d\bar{U}_{J-1,k}^n + d\bar{U}_{J,k+1}^n + d\bar{U}_{J,k-1}^n = \bar{b}_{J,k}^{n-1}, \\
\\
A_3 \bar{U}_{0,K}^n + d\bar{U}_{1,K}^n + d\bar{U}_{0,K-1}^n = \bar{b}_{0,K}^{n-1}, \\
A_2 \bar{U}_{j,K}^n + d\bar{U}_{j-1,K}^n + d\bar{U}_{j+1,K}^n + d\bar{U}_{j,K-1}^n = \bar{b}_{j,K}^{n-1}, \quad 1 \leq j \leq J-1, \\
A_3 \bar{U}_{J,K}^n + d\bar{U}_{J-1,K}^n + d\bar{U}_{J,K-1}^n = \bar{b}_{J,K}^{n-1}, \\
\\
m_{i,j,k}^0 = m_0(x_i, y_j, z_k), \quad 0 \leq i \leq I, \quad 0 \leq j \leq J, \quad 0 \leq k \leq K.
\end{array} \right. \quad (2.25)$$

Аппроксимация и сходимость задачи (2.25) проверяются так же, как в  $R^1$ , и выполняются теоремы:

**Теорема 2.14.** Внесение в численную задачу (2.25) возмущения порядка  $\varepsilon$  приводит к возмущению решения порядка  $|\varepsilon| \frac{4}{f_0 \tau} e^{f_0 T}$ .

**Теорема 2.15.** Задача (2.25) аппроксимирует задачу (1.24) в  $R^3$  с порядком  $\tau^2$ , причем имеет место сходимость:

$$\|m_h - (m)_h\|_{u_h} \leq \frac{4}{f_0} e^{f_0 T} \tau.$$

Очевидно, любое построение точного решения задачи (2.25) будет неэкономично. Построим, как это было сделано для задачи в  $R^2$ , схему расщепления:

$$\begin{cases} m_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}} = -dL_x m_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}} - d(L_y + L_z) m_{i,j,k}^n + b_{i,j,k}^n, \\ m_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}} = m_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}} - dL_y (m_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}} - m_{i,j,k}^n), \\ m_{i,j,k}^{n+1} = m_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}} - dL_z (m_{i,j,k}^{n+1} - m_{i,j,k}^n), \end{cases} \quad (2.26)$$

где

$$L_x m_{i,j,k}^s = m_{i-1,j,k}^s + m_{i+1,j,k}^s,$$

$$L_y m_{i,j,k}^s = m_{i,j-1,k}^s + m_{i,j+1,k}^s,$$

$$L_z m_{i,j,k}^s = m_{i,j,k-1}^s + m_{i,j,k+1}^s.$$

Краевые условия принимают вид, аналогичный (2.17) в  $R^2$ . Проверка аппроксимации для них аналогична проверке аппроксимации самой схемы и дает ту же погрешность.

**Лемма 2.16.** Задача (2.26) аппроксимирует задачу (2.22) на ее решении с порядком  $\tau^2$ , и то же справедливо для краевых условий.

Доказательство.

Запишем систему (2.26) в виде

$$\begin{cases} (E + dL_x) m_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}} = -dL_y m_{i,j,k}^n - dL_z m_{i,j,k}^n + b_{i,j,k}^n, \\ (E + dL_y) m_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}} = m_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}} + dL_y m_{i,j,k}^n, \\ (E + dL_z) m_{i,j,k}^{n+1} = m_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}} + dL_z m_{i,j,k}^n, \end{cases}$$

тогда, подставляя  $m_{i,j}^{n+\frac{2}{3}}$  из третьего уравнения во второе, получим:

$$(E + dL_y)(E + dL_z)m_{i,j,k}^{n+1} - d(E + dL_y)L_z m_{i,j,k}^n - dL_y m_{i,j,k}^n = m_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}},$$

подставим полученное выражение для  $m_{i,j}^{n+\frac{2}{3}}$  в первое уравнение системы:

$$(E + dL_x)(E + dL_y)(E + dL_z)m_{i,j,k}^{n+1} - d(E + dL_x)(E + dL_y)L_z m_{i,j,k}^n - \\ - d(E + dL_x)L_y m_{i,j,k}^n + dL_y m_{i,j,k}^n + dL_z m_{i,j,k}^n = b_{i,j,k}^n,$$

преобразуя, определяем

$$(E + dL_x + dL_y + dL_z)m_{i,j,k}^{n+1} = b_{i,j}^n - \\ - d^3 L_x L_y L_z (m_{i,j,k}^{n+1} - m_{i,j,k}^n) - d^2 (L_x L_y + L_y L_z + L_x L_z)(m_{i,j,k}^{n+1} - m_{i,j,k}^n), \\ (E + dL_x + dL_y + dL_z)m_{i,j,k}^{n+1} = b_{i,j,k}^n + O(\tau^2).$$

Мы получили аппроксимацию (2.22) с порядком  $\tau^2$ , для краевых условий доказательство такое же.

Лемма 2.16. доказана.

**Теорема 2.17.** Решение задачи (2.26) сходится к решению задачи (1.24) в  $R^3$ , причем  $\|m_h - (m)_h\|_{u_h} \leq C\tau$ .

Доказательство.

Сначала оценим погрешность решения, полученную в результате внесения в схему погрешности  $\varepsilon^n = (\varepsilon_{i,j,k}^n)_{(I+1) \times (J+1) \times (K+1)}$ ,

$\|\varepsilon_h\| = \max_{0 \leq n \leq N} |\varepsilon^n|$ . Вычитая из возмущенной схемы исходную, получим

задачу для погрешности  $v_{i,j}^n$  на слое  $n$ :

$$\begin{cases} v_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}} = -dL_x v_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}} - d(L_y + L_z) v_{i,j,k}^n + b_{i,j,k}^n, \\ v_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}} = v_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}} - dL_y (v_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}} - v_{i,j,k}^n), \\ v_{i,j,k}^{n+1} = v_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}} - dL_z (v_{i,j,k}^{n+1} - v_{i,j,k}^n) + \varepsilon_{i,j,k}^n, \\ v_{i,j,k}^0 = \varepsilon_{i,j,k}^0. \end{cases} \quad (2.27)$$

Уравнения для погрешности на границе области выписываются аналогично, но мы их опускаем, так как это сделает запись громоздкой, но не добавит ничего нового в вычисления: при оценке погрешности на слое  $n$  граничные условия дадут такие же неравенства для норм, как и (2.27).

Для всех  $n$  справедлива оценка:

$$1) \quad (1-2d) \max_{i,j,k} \left| v_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}} \right| \leq 4d \max_{i,j,k} |v_{i,j,k}^n| + |b_{i,j,k}^n|,$$

$$\left\| v^{n+\frac{1}{3}} \right\| \leq \frac{1}{1-2d} \left( \|b^n\| + 4d \|v^n\| \right) \leq \frac{1+4d}{1-2d} \|v^n\|;$$

$$2) \quad (1-2d) \max_{i,j,k} \left| v_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}} \right| \leq \max_{i,j,k} \left| v_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}} \right| + 2d \max_{i,j,k} |v_{i,j,k}^n|,$$

$$\left\| v^{n+\frac{2}{3}} \right\| \leq \frac{1}{1-2d} \left( \left\| v^{n+\frac{1}{3}} \right\| + 2d \|v^n\| \right) \leq \frac{1+4d}{(1-2d)^2} \|v^n\| + \frac{2d}{1-2d} \|v^n\|,$$

$$\left\| v^{n+\frac{2}{3}} \right\| \leq \frac{1+6d-4d^2}{(1-2d)^2} \|v^n\|.$$

$$3) \quad (1-2d) \max_{i,j,k} |v_{i,j,k}^{n+1}| \leq \max_{i,j,k} \left| v_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}} \right| + 2d \max_{i,j,k} |v_{i,j,k}^n| + \max_{i,j} |\varepsilon_{i,j,k}^n|,$$

$$\begin{aligned} \|v^{n+1}\| &\leq \frac{1}{1-2d} \left( \left\| v^{n+\frac{2}{3}} \right\| + 2d \|v^n\| + \|\varepsilon^n\| \right) \leq \frac{1+6d-4d^2}{(1-2d)^3} \|v^n\| + \\ &+ \frac{2d}{1-2d} \|v^n\| + \frac{1}{1-2d} \|\varepsilon^n\| \leq \frac{8d^3+1}{(1-2d)^3} \|v^n\| + \frac{1}{1-2d} \|\varepsilon^n\| \end{aligned}$$

Обозначим  $K = \frac{8d^3+1}{(1-2d)^3}$ , тогда

$$\begin{aligned} \|v^{n+1}\| &\leq K \left( K \|v^{n-1}\| + \frac{1}{1-2d} \|\varepsilon^{n-1}\| \right) + \frac{1}{1-2d} \|\varepsilon^n\| \leq \dots \leq \\ &\leq K^{n+1} \|\varepsilon^0\| + \frac{1}{1-2d} \left( \|\varepsilon^n\| + K \|\varepsilon^{n-1}\| + \dots + K^n \|\varepsilon^0\| \right) \leq \\ &\leq \max_{0 \leq s \leq n} \|\varepsilon^n\| \frac{1}{1-2d} \left( 1 + K + \dots + K^{n+1} \right) \leq \\ &\leq \max_{0 \leq s \leq n} \|\varepsilon^n\| \cdot \frac{1}{1-2d} \cdot \frac{K^{n+2}-1}{K-1} \leq \frac{2}{f_0\tau} (e^{f_0T} - 1) \max_{0 \leq s \leq n} \|\varepsilon^n\|. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\|v_h\|_{u_h} = \max_{0 \leq n \leq N} |v^n| \leq \frac{2}{f_0\tau} (e^{f_0T} - 1) \max_{0 \leq s \leq n} \|\varepsilon^n\| = \frac{2}{f_0\tau} (e^{f_0T} - 1) \|\varepsilon_h\|.$$

Так как, согласно лемме 2.16, (2.26) аппроксимирует (2.22) с порядком  $\tau^2$ , а задача (2.22) аппроксимирует задачу (1.24) в  $R^3$  на ее решении  $(m)$  с таким же порядком, то (2.26) аппроксимирует (1.24) в  $R^3$  с порядком  $\tau^2$ , и справедливо:

$$\|m_h - (m)_h\|_{u_h} \leq \tau^2 \frac{2}{f_0\tau} (e^{f_0T} - 1) = C\tau.$$

Теорема 2.17 доказана.



**Утверждение 2.18.** Численная схема (2.26) является экономичной.

Действительно, для перехода со слоя  $n$  на слой  $(n+1)$  сначала определяем из

первого уравнения системы  $m_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}}$  прогонкой по переменной  $x$  ( $KJ$

прогонок), затем из второго уравнения находим  $m_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}}$  прогонкой по  $y$  ( $IK$

прогонок), затем из третьего уравнения находим  $m_{i,j}^{n+1}$  прогонкой по  $z$  ( $IJ$

прогонок). В совокупности получаем количество операций порядка  $IJK$ .

Вычисление правой части  $b_{i,j,k}^n$  требует дополнительно порядка  $nIJK$

операций. Итого сложность задачи для определения  $m_{i,j,k}^N: O((N+N^2)IJK/2)$ .

Коэффициенты прогонки задаются формулами:

1) определение  $m_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}}$  по всем  $j=0, \dots, J$ ,  $k=0, \dots, K$  прогонкой по  $i$ :

$$\begin{cases} C_{X,0} = \frac{-d}{1+d}; & \varphi_{X,0} = -C_{X,0} \frac{1}{d} (b_{0,j,k}^n - dL_y m_{0,j,k}^n - dL_z m_{0,j,k}^n); \\ C_{X,i} = \frac{-d}{1+dC_{X,i-1}}; \\ \varphi_{X,i} = C_{X,i} \left( -\frac{1}{d} (b_{i,j,k}^n - dL_y m_{i,j,k}^n - dL_z m_{i,j,k}^n) + \varphi_{X,i-1} \right); \end{cases} \quad (2.28)$$

$$\begin{cases} m_{I,j,k}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{(b_{I,j,k}^n - dL_y m_{I,j,k}^n - dL_z m_{I,j,k}^n) - d\varphi_{X,I-1}}{1+d(1+C_{X,I-1})}; \\ m_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} = C_{X,i} m_{i+1,j,k}^n + \varphi_{X,i}, \quad i = I-1, \dots, 0; \end{cases} \quad (2.29)$$

2) определение  $m_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}}$  по всем  $i=0, \dots, I$ ,  $k=0, \dots, K$  прогонкой по  $j$ :

$$\left\{ \begin{array}{l} C_{Y,0} = \frac{-d}{1+d}; \\ \varphi_{Y,0} = -C_{Y,0} \frac{1}{d} (m_{i,0,k}^{n+\frac{1}{3}} + dL_y m_{i,0,k}^n); \\ C_{Y,j} = \frac{-d}{1+dC_{Y,j-1}}; \\ \varphi_{Y,j} = C_{Y,j} (-\frac{1}{d} (m_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}} + dL_y m_{i,j,k}^n) + \varphi_{Y,j-1}); \end{array} \right. \quad (2.30)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} m_{i,J,k}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{(m_{i,J,k}^{n+\frac{1}{3}} + dL_y m_{i,J,k}^n) - d\varphi_{Y,J-1}}{1+d(1+C_{Y,J-1})}; \\ m_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} = C_{Y,j} m_{i,j+1,k}^n + \varphi_{Y,j}, \quad j = J-1, \dots, 0; \end{array} \right. \quad (2.31)$$

3) определение  $m_{i,j,k}^{n+1}$  по всем  $i=0, \dots, I$ ,  $j=0, \dots, J$  прогонкой по  $k$ :

$$\left\{ \begin{array}{l} C_{Z,0} = \frac{-d}{1+d}; \\ \varphi_{Z,0} = -C_{Z,0} \frac{1}{d} (m_{i,j,0}^{n+\frac{2}{3}} + dL_z m_{i,j,0}^n); \\ C_{Z,k} = \frac{-d}{1+dC_{Z,k-1}}; \\ \varphi_{Z,k} = C_{Z,k} (-\frac{1}{d} (m_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}} + dL_z m_{i,j,k}^n) + \varphi_{Z,k-1}); \end{array} \right. \quad (2.32)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} m_{i,j,K}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{(m_{i,j,K}^{n+\frac{2}{3}} + dL_z m_{i,j,K}^n) - d\varphi_{Z,K}}{1+d(1+C_{Z,K-1})}; \\ m_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} = C_{Z,k} m_{i,j,k+1}^n + \varphi_{Z,k}, \quad k = K-1, \dots, 0. \end{array} \right. \quad (2.33)$$

## 2.4. Численная реализация стохастической имитационной модели субдиффузии

В этом параграфе строится прямая стохастическая имитационная модель субдиффузии, представляющая собой численную реализацию стохастической имитационной модели, определенной в п.1.4. Заметим, что такая реализация позволяет, во-первых, визуально отслеживать перемещение частиц в процессе субдиффузии, а во-вторых, определить значение функции концентрации  $m(\bar{x}, T)$  (или нормированной концентрации  $p(\bar{x}, T)$ ) в любой момент времени  $T$ .

Корректность данной модели обеспечивается теоремой 1.35 предыдущей главы.

### 1) Начальное распределение частиц.

Зададим набор  $K$  частиц, каждой частице поставим в соответствие тройку  $(\bar{x}, t, \tau)$ , где  $\bar{x}$  – координата узла, в котором находится частица в момент времени  $t$ ,  $\bar{x} \in R^n$ , и  $\tau$  – время оставшейся задержки частицы в этом узле. Моделирование блуждания на плоскости и в пространстве отличается от моделирования одномерного блуждания только хранением дополнительных координат для частиц.

Начальное распределение частиц по узлам решетки задаем в соответствии с (1.41). Краевое условие отражения от границ в стохастической модели означает, что частицы при блуждании не покидают рассматриваемую область.

### 2) Реализация блуждания на отрезке $[0, T]$ .

Правила блуждания I-II п.1.5 численно реализуются следующим образом. Генерируем для каждой частицы  $c_i$  последовательность времен задержек до тех пор, пока они в сумме не превысят  $T$ . Пусть всего получили  $N_i$  задержек, тогда заменяем координату  $\bar{x}$  частицы равновероятно на координату одного из соседних узлов  $N_i$  раз. При этом если частица находит-

ся в граничном узле, то она может равновероятно шагнуть в один из соседних с ней внутренних узлов области либо остаться в граничном узле (частица может шагнуть «за границу», оттолкнуться от границы и остаться в граничном узле). Полученное в итоге значение  $\bar{x}$  считаем положением частицы в момент времени  $T$ .

Время задержки  $v$ , заданное функцией плотности вероятности  $f(t)$ , моделируется с использованием генератора равномерно распределенных на  $[0;1]$  случайных величин следующим образом.

**Лемма 2.19.** Случайная величина  $v$  с плотностью вероятности  $f(t)$  представима в виде функции равномерно распределенной на отрезке  $[0;1]$  случайной величины  $u$ :

$$v = \sqrt[\alpha]{A}((1-u)^{-1/\alpha} - 1) \quad (2.34)$$

Доказательство.

Построим монотонно возрастающую функцию  $v(u)$  такую, что

$$(u = 0) \rightarrow (v = 0), \quad (u = 1) \rightarrow (v = \infty).$$

Известно, [57], что для монотонно возрастающей функции  $v(u)$  функции распределения случайных величин  $v(u)$  и  $u$  связаны соотношением:

$$F_{v(u)}(t) = F_u(v^{-1}(t)).$$

Тогда

$$\rho_{v(u)}(t) = (v^{-1}(t))'_t \cdot \rho_u(v^{-1}(t)) \quad (2.35)$$

где  $\rho_{v(u)}(t)$  - плотность вероятности случайной величины  $v(u)$ ,  $\rho_u(s)$  - плотность вероятности случайной величины  $u$ . В нашем случае  $\rho_{v(u)}(t) = f(t)$ ,  $\rho_u(s) = 1$ , и из (2.35) получаем

$$(v^{-1}(t))'_t = \frac{\alpha A}{(\sqrt[\alpha]{A} + t)^{\alpha+1}},$$

$$v^{-1}(t) = 1 - \frac{A}{(\sqrt[\alpha]{A} + t)^\alpha},$$

и из последнего равенства получаем (2.34). Лемма 2.19 доказана.

### 3) Моделирование источника.

Пусть источник задан функцией  $g(\bar{x}, t)$ . Нам необходимо разбить интервал  $[0, T]$  на некоторое количество  $M$  промежутков  $[0, t_1], [t_1, t_2], \dots, [t_{M-1}, t_M]$  так, чтобы на каждом промежутке выделялась ровно одна частица, а на последнем не более одной частицы. Следовательно, необходимо выполнение соотношений

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} g(\bar{x}, t) dt = G(\bar{x}, t_{i+1}) - G(\bar{x}, t_i) = \frac{1}{S}, \quad i=0, \dots, M-2. \quad (2.36)$$

$$\int_{t_{M-1}}^T g(\bar{x}, t) dt = G(\bar{x}, t_M) - G(\bar{x}, t_{M-1}) \leq \frac{1}{S},$$

где  $G(\bar{x}, t)$  – первообразная функции  $g(\bar{x}, t)$ . Определив первообразную, подставляя  $t_0=0$  в (2.36), последовательно определяем  $t_1, t_2, \dots, t_{M-1}$ .

Для частицы, появившейся на интервале  $[t_i, t_{i+1}]$ , далее моделируется ее блуждание на временном отрезке  $[t_{i+1}, T]$  с началом блуждания в момент  $t_{i+1}$ , согласно п.2.

### 4) Моделирование стока.

Пусть сток задан функцией  $g(\bar{x}, t)$ . Интервал  $[0, T]$  разбивается на промежутки  $[0, t_1], [t_1, t_2], \dots, [t_{M-1}, t_M]$  так, что на каждом промежутке удаляется одна частица, т.е. выполняется (2.36).

### 5) Определение функции $m(\bar{x}, T)$ .

Приближенные значения функции  $m(\bar{x}, T)$  определяем по формуле (1.42).

Определим сложность рассмотренного метода блужданий. В силу взаимной независимости перемещений частицы, по индукции легко доказать что

$$\langle r^2(T) \rangle = q(T)h^2, \quad (2.37)$$

где  $q(T)$  – количество шагов частицы за время  $T$ . Тогда, в силу (1.7) и (2.37), количество шагов для каждой частицы будет иметь порядок  $T^\alpha/h^2$ . На каждом шаге генерируется задержка по формуле (2.34) и изменяется координата час-

тицы. Таким образом, если общее количество частиц равно  $K$ , то сложность реализации метода составит  $O(3KT^\alpha/h^2)$ .

## 2.5. Сравнение численных моделей

Сравним эффективность моделирования субдиффузии методами численного решения уравнения субдиффузии (аппроксимация интегроразностного оператора) и прямого стохастического моделирования.

Пусть требуется определить функцию  $m(\bar{x}, T)$  с некоторой точностью  $\varepsilon$ . Оценим возникающую при этом сложность методов.

Метод численного интегрирования имеет точность порядка  $O(\tau)$ , и при  $\tau=\varepsilon$  количество слоев по времени, используемых для вычисления, есть  $N=T/\tau=T/\varepsilon$ . Тогда сложность метода имеет порядок  $O(L \cdot N^2/2) = O(L \cdot T^2/2\varepsilon^2)$ , где  $L$  – количество узлов сетки (в  $R^1, R^2, R^3$ ).

Метод прямого стохастического моделирования при заданной вероятности  $P_0$  соблюдения указанной точности, потребует в соответствии с (1.47) использование количества частиц  $K_p$  (т.е. количество реализаций блуждания):

$$K_p = M(T) \cdot S \geq M(T) \frac{M(T)}{4\varepsilon^2} \left( \Phi^{-1} \left( \frac{1-P_0}{2} \right) \right)^2.$$

Тогда сложность имеет порядок  $O(K_p T^\alpha/h^2) = O\left(\frac{3T^\alpha \cdot M^2(T)}{4h^2\varepsilon^2} \left( \Phi^{-1} \left( \frac{1-P_0}{2} \right) \right)^2\right)$ .

Следовательно, отношение временных затрат  $t_{числ}$  и  $t_{стох}$  методов численного интегрирования и прямого стохастического моделирования есть

$$\frac{t_{числ}}{t_{стох}} = \frac{2h^2LT^2}{3T^\alpha M^2(T)} \left( \Phi^{-1} \left( \frac{1-P_0}{2} \right) \right)^{-2}, \quad (2.38)$$

и метод численного интегрирования более эффективен, чем метод прямого стохастического моделирования, когда это отношение меньше 1, для любой

требуемой точности вычисления  $\varepsilon$ .

Например, при решении интегроразностного уравнения при наличии интенсивного источника  $M(T)$  быстро растет, отношение (2.38) становится меньше единицы, и метод численного интегрирования имеет преимущество в скорости решения. То же справедливо для процессов с большими по модулю значениями начальной функции  $m_0(\bar{x}, 0)$ .

С другой стороны, в случае ограниченных значений функции  $M(t) \forall t$  при достаточно больших значениях времени  $T$  метод прямого стохастического моделирования более эффективен.

С увеличением  $\alpha$  сравнительная эффективность метода прямого стохастического моделирования убывает, так как увеличивается количество шагов каждой частицы и, следовательно, время реализации блуждания. Это проиллюстрировано в табл.2.1. Тем не менее, метод прямого моделирования вычисляет функцию  $m(\bar{x}, t)$  в основном быстрее метода численной аппроксимации интегроразностного уравнения.

При увеличении количества узлов сетки  $L$  сравнительная эффективность метода прямого стохастического моделирования еще более возрастает, так как для его реализации величина  $L$  не имеет принципиального значения.

Таблица 2.1

Значения отношения  $\frac{t_{числ}}{t_{стох}}$  при  $P_0=0.999$ ,  $h=0.01$ ,  $L=10^4$  для различных  $\alpha$

| T              | 10    | 50     | 100    | 500      | 1000     | 10000    |
|----------------|-------|--------|--------|----------|----------|----------|
| $\alpha = 0.3$ | 3.085 | 47.602 | 154.66 | 2385.761 | 7751.36  | 388488.3 |
| $\alpha = 0.5$ | 1.947 | 21.768 | 61.571 | 688.387  | 1947.054 | 61571.24 |
| $\alpha = 0.8$ | 0.975 | 6.731  | 15.466 | 106.694  | 245.119  | 3884.883 |

**Вывод 2.20.** Метод прямого стохастического моделирования является в большинстве случаев более эффективным, чем метод численной аппроксимации интегроразностного уравнения. Отношение (2.38) позволяет сравнивать эффективность методов для каждой конкретной задачи.

### ГЛАВА 3. ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ СУБДИФФУЗИИ

В этой главе строятся вычислительные алгоритмы и разрабатываются программы для численной реализации модели субдиффузии на евклидовой решетке. Программы разработаны на языке C++ в среде программирования Borland C++ Builder 6.0 и предназначены для работы в 32-разрядных операционных системах семейства MS Windows. Все программы реализованы на основе диалоговых окон и имеют удобный пользовательский интерфейс.

В п.3.1 описан интерфейс программы, разработанной для численной реализации модели (В) субдиффузии с источниками в  $R^1$ - $R^3$ .

В п.3.2 предлагается алгоритм определения функции концентрации, основанный на методе прямого стохастического моделирования субдиффузии, приводятся оценки погрешности решения в зависимости от количества частиц и от времени процесса субдиффузии. В п.3.3 разрабатывается алгоритм определения функции концентрации, основанный на численных методах решения уравнения субдиффузии, приводятся оценки погрешности решения. В п.3.4 приведено сравнение временных затрат на реализацию предложенных алгоритмов и указаны значения расхождения между функциями концентрации, полученными предложенными методами.

В п.3.5 рассматривается вычисление среднего квадрата перемещения частиц в  $R^1$ - $R^3$  для прямой стохастической модели субдиффузии и для модели субдиффузии, описанной уравнением (1.24). Показано, что эти модели реализуют требуемую аномальную кинетику субдиффузии (1.7).

В п. 3.6 описана программа, разработанная для построения траекторий блуждания частиц в  $R^1$ - $R^2$ .



### 3.1. Описание интерфейса программы для численной реализации субдиффузии с источниками

Программа предназначена для численной реализации субдиффузии с источниками, заданной моделью (В) в  $R^1$ - $R^3$ . В программе выполняются следующие задачи:

- по заданным характеристикам субдиффузии  $(D_\alpha, \alpha)$  и начальному распределению концентрации  $m_0(\bar{x})$  вычисляется значение  $m(\bar{x}, t)$  в момент времени  $t$  следующими методами:
  - методом прямого стохастического моделирования (п. 1.5, 2.4);
  - методом численной аппроксимации интегроразностного уравнения субдиффузии (1.24) (метод дискретизации интегроразностного оператора в  $R^1$  (п.2.1) и методы экономичных численных схем расщепления в  $R^2$  и  $R^3$  (п. 2.2-2.3));
- вычисляется средний квадрат перемещения частиц для функций  $m(\bar{x}, t)$ , полученных методом прямого стохастического моделирования и методом численной аппроксимации уравнения субдиффузии.

При этом полученные выборки значений функции  $m(\bar{x}, t)$  сохраняются в текстовые файлы и параметры текущей задачи и массив данных по вычислению функции  $m(\bar{x}, t)$  сохраняются в файл, что дает возможность продолжения вычисления.

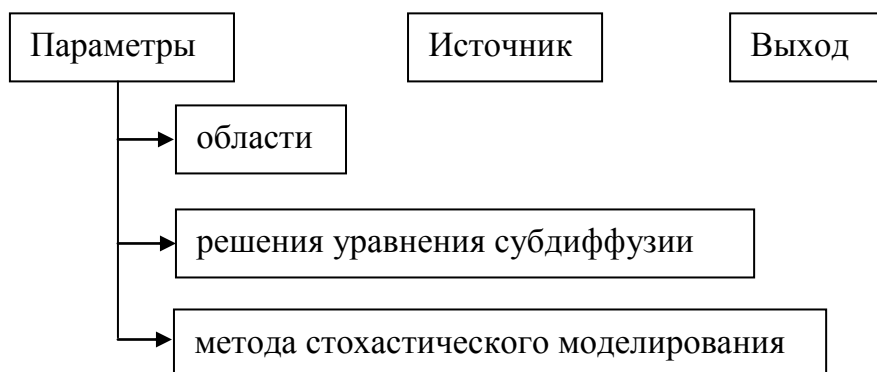
*Процессы, полученные методом прямого стохастического моделирования и методом численной аппроксимации уравнения субдиффузии будем далее называть, соответственно, стохастическим и дискретным.*

Для ввода параметров субдиффузии разработана система диалоговых окон. Программа позволяет редактировать следующие параметры задачи: коэффициент диффузии  $D_\alpha$ , показатель аномальности  $\alpha$ , размеры области диффузии и размер ячеек сетки, время процесса, количество итераций по времени для дискретного процесса и количество блуждающих частиц для

стохастического процесса.

На рис.3.1 изображено главное диалоговое окно. Выделены следующие элементы интерфейса:

1. Главное меню. Схематически главное меню можно изобразить так:



2. Панель ввода основных параметров субдиффузии: показателя аномальности  $\alpha$ , коэффициента диффузии  $D_\alpha$ , времени расчетного процесса  $T$ .
3. Панель выбора метода вычисления функции концентрации.
4. Кнопка запуска программы.
5. Время работы программы.

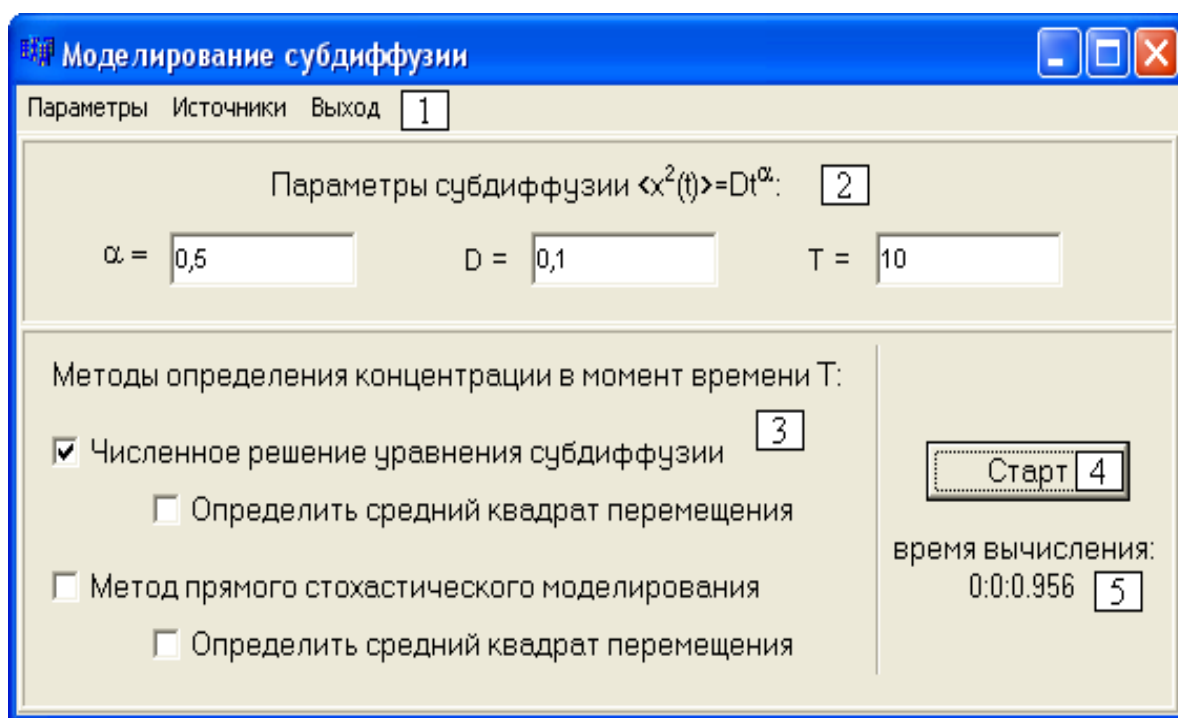


Рис.3.1. Главное диалоговое окно

Главное меню дает доступ к редактированию всех параметров задачи и сохранению результатов расчетов в файлы.

Окно редактирования параметров области диффузии появляется при выборе в меню Параметры → области. Оно позволяет выбрать размерность области вычислений ( $R^1-R^3$ ), вводить протяженность области вычислений вдоль координатных осей и шаг сетки для приближенного вычисления. На рис.3.2 приведен пример этого диалогового окна.

Рис.3.2. Диалоговое окно редактирования параметров области

Если в качестве метода определения концентрации выбрано численное решение уравнения субдиффузии, то параметры для этого метода вводятся в диалоговом окне, которое вызывается при выборе в меню Параметры → решения уравнения субдиффузии. Пример этого диалогового окна приведен на рис.3.3. Точность вычисления дискретного процесса определяется величиной шага по времени  $\Delta t$ .

Параметры вычисленного процесса сохраняются в файл, который может использоваться для дальнейшего вычисления концентрации.

Для определения функции концентрации возможны два варианта: либо вычисление процесса с момента времени  $t=0$ , либо продолжение вычисления задачи, сохраненной в файле.

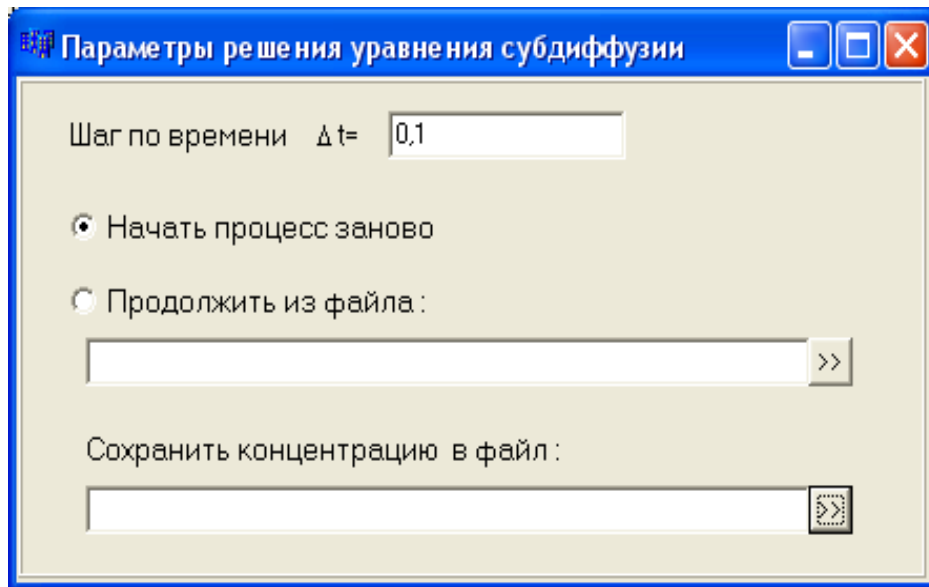


Рис.3.3. Окно редактирования параметров решения уравнения субдиффузии

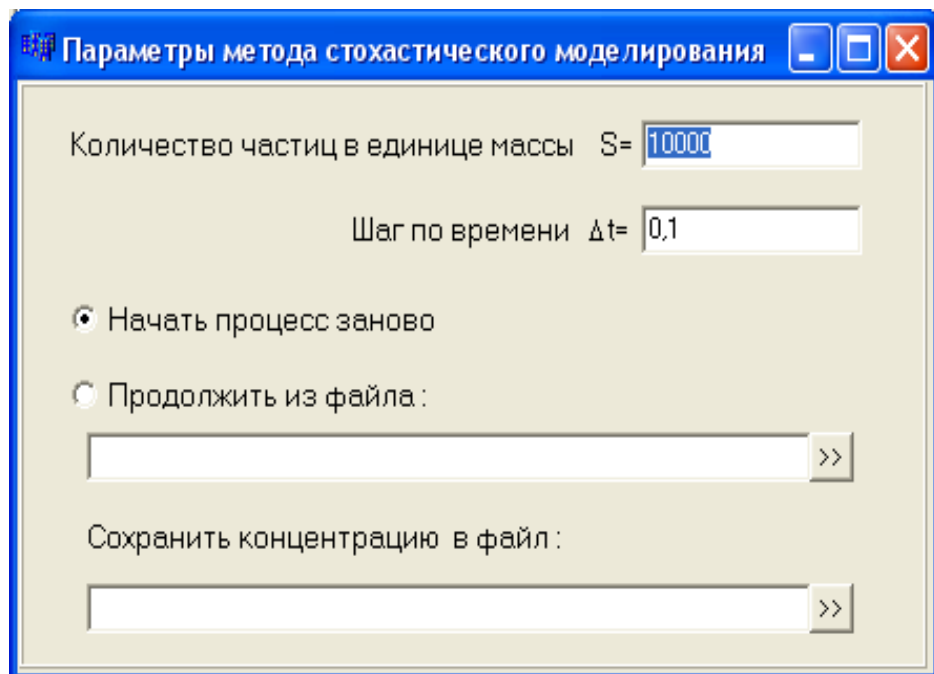


Рис.3.4. Диалоговое окно редактирования параметров метода стохастического моделирования

Если в главном диалоговом окне выбрано «определить средний квадрат перемещения», то для решения уравнения субдиффузии  $m(\bar{x}, t)$  вычисляются значения  $\langle r^2(t) \rangle$  при  $t = 0, \Delta t, 2\Delta t, 3\Delta t, \dots, T$  по формуле

$$\langle r^2(t) \rangle = \frac{dx \cdot dy \cdot dz}{M(t)} \cdot \sum_{\bar{x}} |\bar{x}|^2 m(\bar{x}, t),$$

где  $dx, dy, dz$  – шаг сетки по  $x, y, z$  соответственно,  $M(t)$  – общая масса в

момент времени  $t$ . Значения  $\langle r^2(t) \rangle$  сохраняются в отдельный файл.

Если в качестве метода определения концентрации выбран метод прямого стохастического моделирования, то параметры для этого метода вводятся в диалоговом окне, которое вызывается при выборе в меню Параметры  $\rightarrow$  метода стохастического моделирования. Пример этого диалогового окна приведен на рис.3.4. Точность вычисления стохастического процесса определяется количеством частиц  $S$ , используемым для моделирования единицы концентрации.

Параметры вычисленного процесса сохраняются в файл, который может использоваться для дальнейшего вычисления концентрации.

Для определения функции концентрации возможны два варианта: либо вычисление процесса с момента времени  $t=0$ , либо продолжение вычисления задачи, сохраненной в файле.

Если в главном диалоговом окне выбрано «определить средний квадрат перемещения», то для блуждающих частиц вычисляются значения квадрата их перемещения  $r^2(t)$  при  $t = 0, \Delta t, 2\Delta t, 3\Delta t, \dots, T$ , далее определяются значения  $\langle r^2(t) \rangle$  при  $t = 0, \Delta t, 2\Delta t, 3\Delta t, \dots, T$  усреднением по ансамблю всех частиц и сохраняются в отдельный файл.

### **3.2. Алгоритм вычисления концентрации методом прямого стохастического моделирования**

В этом параграфе строится алгоритм прямой стохастической реализации блуждания частиц на временном интервале  $[0;T]$  согласно п.1.5, 2.4 и приводится тестирование предлагаемого алгоритма в  $R^1$ .

В качестве краевых условий рассматривается условие отражения от границ области, заданной в диалоговом окне «Параметры области».

Информация о частице (ее координаты и время задержки) хранится в структуре:

*struct inform*

{*long* plx; – координата x частицы (номер ячейки вдоль оси Oх)  
*long* ply; – координата y частицы (номер ячейки вдоль оси Oy)  
*long* plz; – координата z частицы (номер ячейки вдоль оси Oz)  
*float* resttime; }; – оставшаяся задержка частицы

Пусть требуется определить функцию концентрации в момент времени  $T$ .  
 Алгоритм.

1. *Начальные данные для вычисления:*

1.1. Если процесс вычисляется с момента времени  $t=0$ , то

1.1.1. Количество частиц  $k_i(0)$  в каждой ячейке  $\bar{x}_i$  определяется по начальным данным  $m_0(\bar{x}_i)$  по формуле (1.41). Суммируя эти количества, получаем общее количество частиц  $K(0)$ . Создаем массив частиц (типа *inform*) длины  $K(0)$ .

1.1.2. По формуле (1.41) определяем координаты частиц; задержки частиц задаем на основе (2.34) с использованием генератора равномерно распределенных на  $[0;1]$  случайных величин.

1.2. Если выбрано продолжение вычисления задачи, сохраненной в файле, т.е. процесс вычисляется с момента времени  $t \neq 0$ , то

1.2.1. Проверить совпадение заданных параметров субдиффузии и параметров субдиффузии из файла, выбранного для продолжения. Если параметры различаются, выдать сообщение об ошибке.

1.2.2. Скопировать из заданного файла массив частиц (информация о координатах и задержках).

2. *Движение частиц.* Цикл по всем частицам:

2.1. Для частицы генерируется последовательность  $n$  задержек так, что

$(n-1)$  задержка суммарно не превосходит  $(T-t)$ , а  $n$  задержек в сумме превосходят или равны  $(T-t)$ .

2.2.  $n$  раз выбирается одна из координат частицы ( $x$ ,  $y$  или  $z$  равновероятно) и равновероятно увеличивается или уменьшается на 1, что эквивалентно совершению  $n$  шагов в пространстве равновероятно в одну из соседних ячеек. Из граничной ячейки частица может перейти в любую соседнюю ячейку области либо остаться в той же ячейке (при попытке шагнуть «за границу» частица наталкивается на границу и остается в той же ячейке).

2.3. Оставшееся время задержки (после  $T$ ) сохраняется для того, чтобы иметь возможность впоследствии продолжить процесс блуждания.

3. *Движение частиц, появляющихся из источника.* Разбиваем время блуждания  $(T-t)$  на  $N$  интервалов длины  $dt$ . Цикл по  $i$  от 1 до  $N$ :

3.1. Определяем количество частиц, появившихся в интервале  $[t, t+idt)$ . Для каждой из этих частиц реализуем блуждание на временном интервале  $[t+idt, T]$ . Цикл по всем частицам:

3.1.1. Для частицы генерируется последовательность  $n$  задержек так, что  $(n-1)$  задержка суммарно не превосходит  $(T-t-idt)$ , а  $n$  задержек в сумме превосходят или равны  $(T-t-idt)$ .

3.1.2.  $n$  раз выбирается одна из координат частицы ( $x$ ,  $y$  или  $z$  равновероятно) и равновероятно увеличивается или уменьшается на 1. Из граничной ячейки частица может перейти в любую соседнюю ячейку области либо остаться в той же ячейке.

3.1.3. Оставшееся время задержки (после  $T$ ) сохраняется для того, чтобы иметь возможность впоследствии продолжить процесс блуждания.

4. *Сохранение полученной информации.* Массив частиц (координаты и задержки) сохраняется в файл для последующего продолжения процесса субдиффузии. Определяется количество частиц в каждом узле:  $k_i(T)$ ,

и по формуле (1.42) вычисляются значения функции  $m_K(\bar{x}_i, T)$  в узлах  $\bar{x}_i$  сетки. Значения  $m_K(\bar{x}_i, T)$  сохраняются в текстовый файл.

##### 5. *Смон.*

Численный анализ точности предложенного алгоритма проведем на фундаментальном решении задачи (1.24).

В приложении 1 доказано (теорема П.1.12), что решение уравнения (1.24) аппроксимирует решение  $W(\bar{x}, t)$  начальной задачи (П.1.3-П.1.4) для уравнения с дробной производной по времени с порядком  $O(h^2)$ . С другой стороны, в п.1.6 (теорема 1.35) доказано, что функция  $m_{K(t)}(\bar{x}, t)$ , полученная в результате реализации метода прямого стохастического моделирования, при увеличении количества блуждающих частиц сходится по вероятности к решению  $m(\bar{x}, t)$  уравнения субдиффузии (1.24) с порядком сходимости  $O(\varepsilon)$ , где  $\varepsilon$  зависит от количества  $S$  частиц на единицу концентрации. Следовательно, функция  $m_{K(t)}(\bar{x}, t)$  аппроксимирует функцию  $W(\bar{x}, t)$  с порядком  $O(\varepsilon + h^2)$ . Из формулы (1.47) получаем оценку для  $\varepsilon$ :

$$\varepsilon \geq \left( \frac{M(T)}{4S} \right)^{1/2} \Phi^{-1} \left( \frac{1-P_0}{2} \right). \quad (3.1)$$

Известно, что точное фундаментальное решение уравнения с дробной производной по времени в  $R^1$  может быть определено через функции Мейера, [78]. Построим это решение  $W(x, t)$ , используя реализацию функций Мейера в пакете Maple 10, и сравним его с полученным нами решением  $m_{K(t)}(\bar{x}, t)$  для разных  $S$ . Графики функций  $W(x, t)$  и  $m_{K(t)}(\bar{x}, t)$  при  $m_0(x) = \delta(x)$  для  $S=10^4$  и  $S=10^6$  в сравнении представлены на рис.3.5 и рис.3.6 для значений  $t=10$  и  $t=100$ . Соответственно, на рис.3.7 и рис.3.8 приведены графики отклонения функции  $m_{K(t)}(x, t)$  от функции  $W(x, t)$  (графики погрешности вычисления).



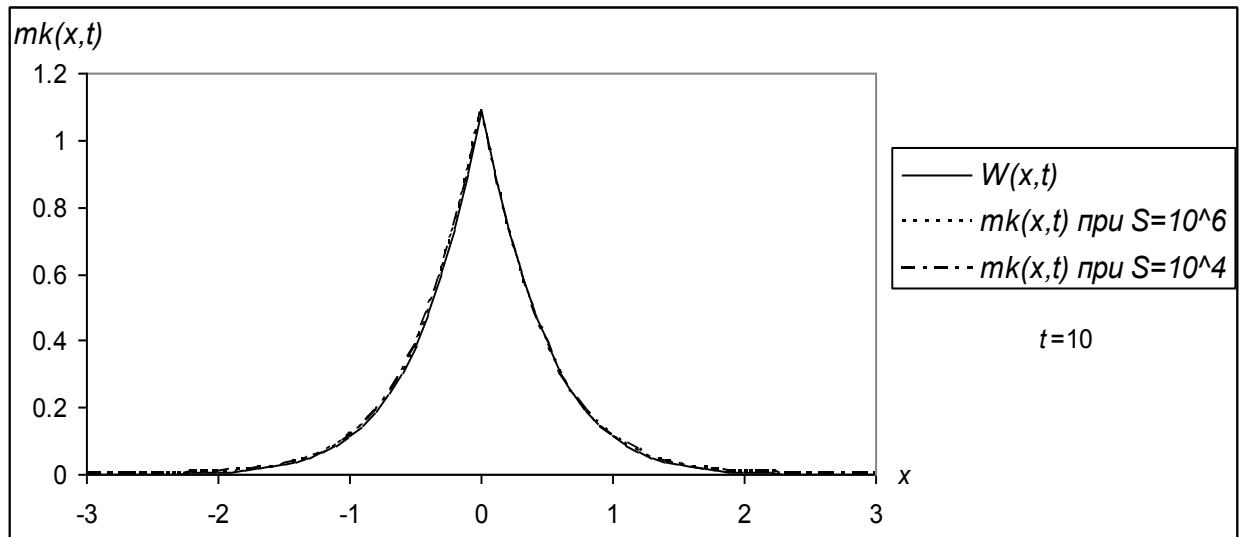


Рис.3.5. Сравнение графиков функций  $W(x,t)$  (решение задачи (П.1.3-П.1.4)) и  $mk(x,t)$  (решение уравнения (1.24), полученное методом прямого стохастического моделирования),  $m_0(x) = \delta(x)$ , для  $t=10$ ,  $dx=0.01$ ,  $\alpha=0.5$ ,  $D_\alpha=0.1$

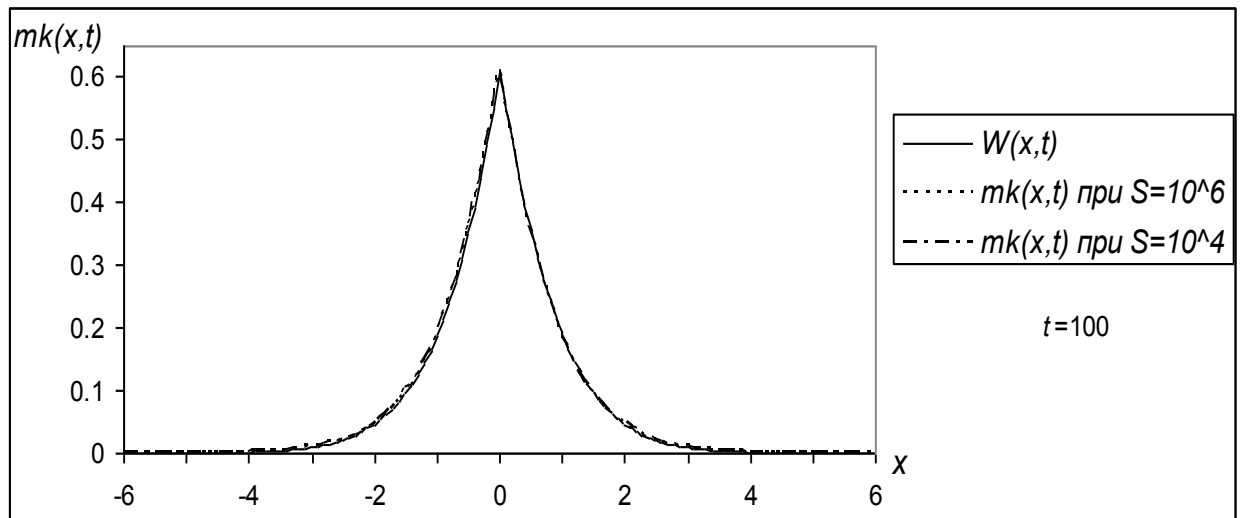


Рис.3.6. Сравнение графиков функций  $W(x,t)$  (решение задачи (П.1.3-П.1.4)) и  $mk(x,t)$  (решение уравнения (1.24), полученное методом прямого стохастического моделирования),  $m_0(x) = \delta(x)$ , для  $t=100$ ,  $dx=0.01$ ,  $\alpha=0.5$ ,  $D_\alpha=0.1$

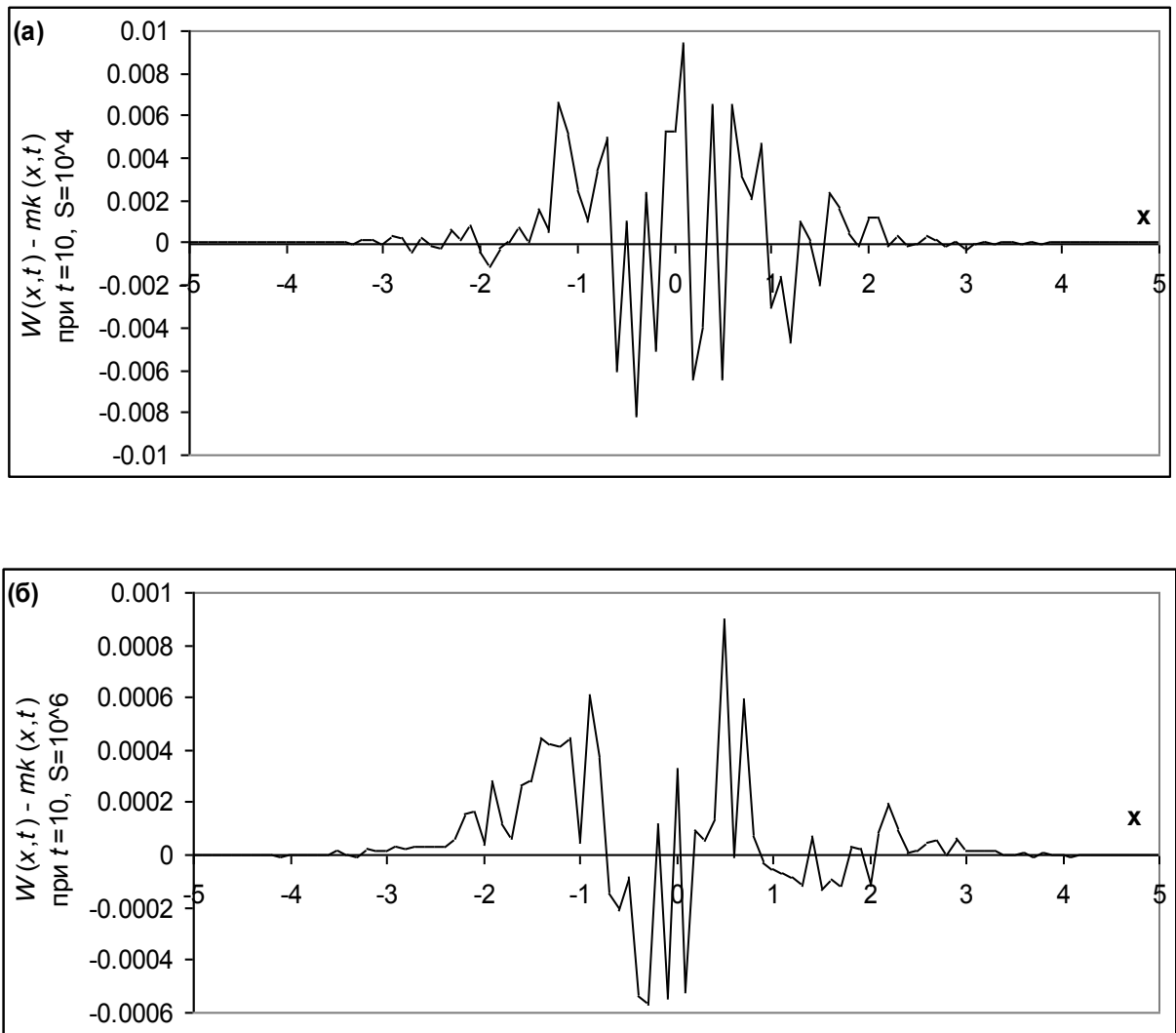


Рис.3.7. Графики отклонения функций  $W(x,t)$  и  $mk(x,t)$ , представленных на рис.3.5,  $t=10$ , (а) для  $S=10^4$ ; (б) для  $S=10^6$ . Для  $S=10^4$  отклонение примерно в 10 раз больше, чем для  $S=10^6$ , что соответствует оценке (3.1)

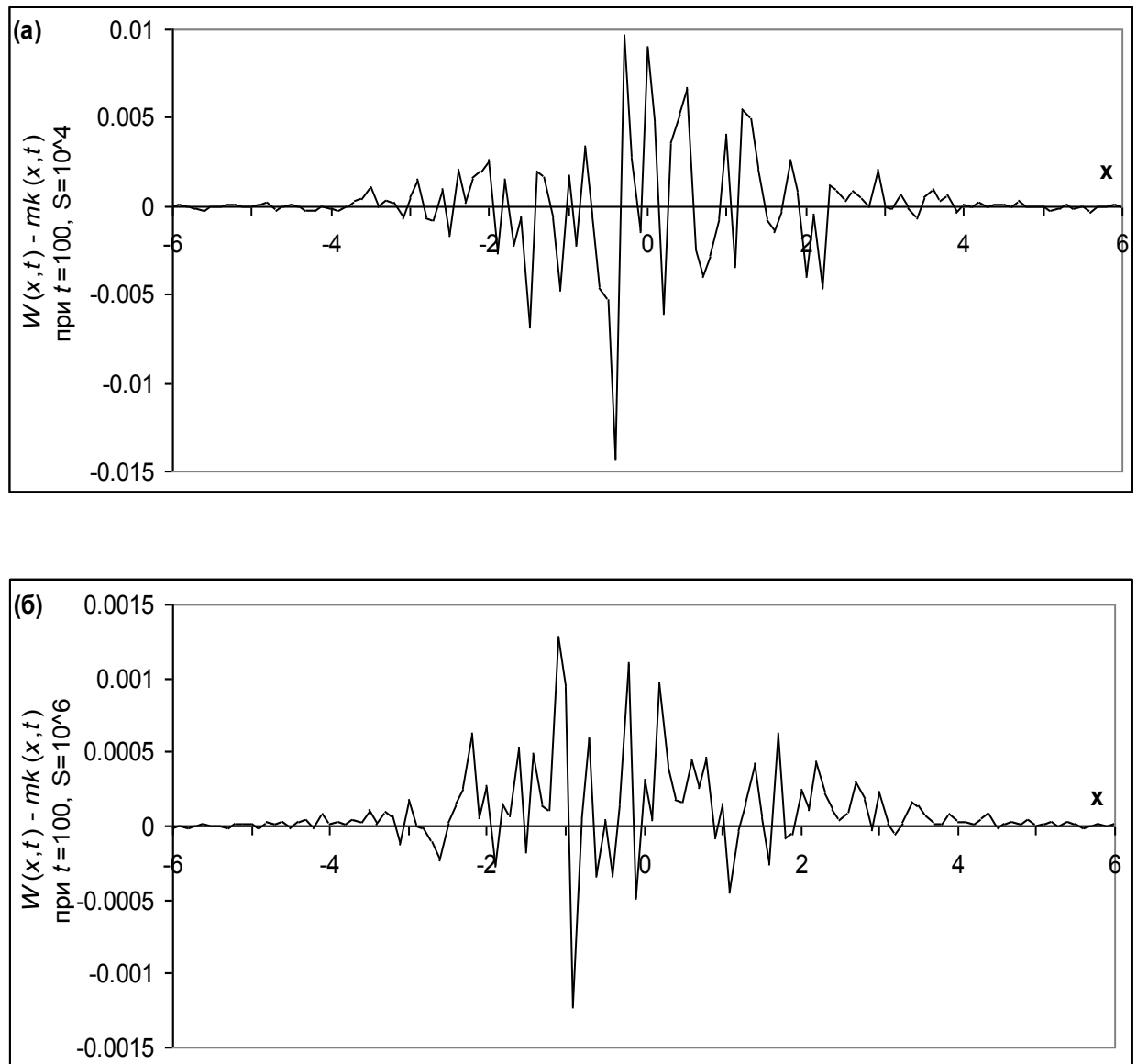


Рис.3.8. Графики отклонения функций  $W(x,t)$  и  $mk(x,t)$ , представленных на рис.3.6,  $t=100$ , (а) для  $S=10^4$ ; (б) для  $S=10^6$ . Для  $S=10^4$  отклонение примерно в 10 раз больше, чем для  $S=10^6$ , что соответствует оценке (3.1)

Сравним практически полученную погрешность  $\varepsilon_{\text{пр}}$  рассматриваемого метода с теоретически ожидаемой погрешностью  $\varepsilon$ . С вероятностью  $P_0=0.99$  погрешность вычислений  $\varepsilon$  должна достигаться при использовании  $S \geq 1.66 \frac{M(T)}{\varepsilon^2}$  частиц, п.1.6. Тогда при  $M(T)=1$  величина  $\varepsilon$  должна определяться соотношением

$$\varepsilon \geq \sqrt{1.66 \frac{M(T)}{S}} = \sqrt{\frac{1.66}{S}}.$$

Значения  $\varepsilon_{\text{пр}}$  и  $\varepsilon$  в сравнении для разных  $t$  и  $S$  при  $h=0.01$  приведены в табл.3.1. В частности, погрешность вычислений для приведенных на рис.3.7 и 3.8 графиков для  $S=10^4$  и  $S=10^6$  имеет ожидаемый порядок.

Таблица 3.1

Сравнение практически полученной погрешности вычислений  $\varepsilon_{\text{пр}}$  с теоретически ожидаемой погрешностью  $\varepsilon$ . Максимальное абсолютное значение величины  $\varepsilon_{\text{пр}}$  достигалось приблизительно 1-2 раза из 200 значений, остальные значения  $\varepsilon_{\text{пр}}$  не превосходили ожидаемую погрешность  $\varepsilon$

| S                                                                       |          | $10^4$ | $10^5$  | $10^6$  | $10^7$   |
|-------------------------------------------------------------------------|----------|--------|---------|---------|----------|
| ожидаемая с вероятностью 0.99 погрешность $\varepsilon$ для указанных S |          | 0.0128 | 0.00407 | 0.00128 | 0.000407 |
| среднеквадратическое значение $\varepsilon_{\text{пр}}$                 | $t=10$   | 0.0025 | 0.00114 | 0.00064 | 0.00027  |
|                                                                         | $t=100$  | 0.0023 | 0.00167 | 0.00058 | 0.00031  |
|                                                                         | $t=1000$ | 0.0024 | 0.00152 | 0.00062 | 0.00029  |
| максимальное абсолютное значение $\varepsilon_{\text{пр}}$              | $t=10$   | 0.0093 | 0.00467 | 0.00089 | 0.000481 |
|                                                                         | $t=100$  | 0.014  | 0.00391 | 0.00128 | 0.000466 |
|                                                                         | $t=1000$ | 0.0132 | 0.00452 | 0.00126 | 0.000506 |

В отличие от  $R^1$ , в  $R^2$  и  $R^3$  нет известных решений уравнения (1.24) или каких-либо его аппроксимаций. Поэтому численный анализ точности предложенного алгоритма в  $R^2$  и  $R^3$  затруднен. Тем не менее, заметим, что реализация метода прямого стохастического блуждания в  $R^2$  и  $R^3$  отличается от реализации блуждания в  $R^1$  только наличием дополнительных соседних узлов сетки, в которые может переместиться частица, в остальном принцип реализации тот же. Поэтому, исходя из успешного тестирования алгоритма реализации блуждания в  $R^1$  на фундаментальном решении уравнения субдиффузии, мы считаем этот алгоритм корректным также в  $R^2$  и  $R^3$ .

### 3.3. Алгоритм вычисления концентрации методом численной аппроксимации уравнения субдиффузии

В этом параграфе для вычисления концентрации строятся алгоритмы на основе методов численной аппроксимации уравнения субдиффузии (1.24), предложенных п.2.1-2.3, и приводится тестирование алгоритма в  $R^1$ .

В качестве краевых условий рассматривается условие отражения от границ области, заданной в диалоговом окне «Параметры области».

Значения функции концентрации хранятся в массиве  $m_{i,j,k}^n$ , где  $i, j, k$  – номера ячейки вдоль осей  $Ox$ ,  $Oy$  и  $Oz$  соответственно,  $n$  – номер слоя по времени. Шаг по времени обозначим за  $dt$ .

#### Алгоритм определения функции концентрации в $R^1$ .

Пусть субдиффузия начинается в момент времени  $t_0$ , и требуется определить значения функции концентрации на временном интервале  $[t_0, t+t_0]$  как решение начально-краевой задачи (2.2). Аппроксимируем задачу (2.2) системой (2.6) и решаем эту систему следующим образом.

1. Определить общее количество слоев по времени:  $N = (t+t_0)/dt$ .
2. *Начальные данные для вычисления:*
  - 2.1. Если процесс вычисляется с момента времени  $t_0=0$ , то определить значения  $m_i^0 = m(i,0)$  по начальным данным.
  - 2.2. Если процесс вычисляется с момента времени  $t_0 \neq 0$ ,  $t_0 = N_0 \cdot dt$ , то
    - 2.2.1. Проверить совпадение заданных параметров субдиффузии и параметров субдиффузии из файла, выбранного для продолжения. Если параметры различаются, выдать сообщение об ошибке.
    - 2.2.2. Скопировать из заданного файла массив значений  $m_i^n$ , вычисленных на слоях  $n=0, \dots, N_0$  для интервала  $[0, t_0]$ .

3. Определить массив  $C_i$  по формулам (2.7) – это общие данные для всех временных слоев.
4. *Определение концентрации.* Цикл по  $n$  от  $[t_0/dt]$  до  $[(t_0+t)/dt]$ ,  $n$  – номер текущего слоя:
  - 4.1. Определить значения  $b_i^{n-1}$  по всем  $i=0, \dots, K$  по формулам (2.5).
  - 4.2. Определить коэффициенты прогонки  $\varphi_i$ , по формулам (2.7).
  - 4.3. Вычислить значения функции концентрации  $m_i^n$  по формулам (2.8)
  - 4.4. Если  $n=N$  стоп (значения концентрации получены в массиве  $m_i^n$ ).
 Иначе переход на шаг 4.1.
5. *Сохранение полученной информации.* Массив концентраций  $m_i^n$  (значения на всех слоях  $n=0, \dots, N$ ) сохраняется в файл для того, чтобы иметь возможность продолжить вычисление концентрации. Значения  $m_i^N$  (значения функции концентрации в момент времени  $t+t_0$ ) сохраняются в текстовый файл.
6. Стоп.

Численный анализ точности алгоритма проведем на фундаментальном решении задачи (1.24).

В приложении 1 доказано (теорема П.1.12), что решение уравнения (1.24) аппроксимирует решение начальной задачи для уравнения с дробной производной по времени (П.1.3-П.1.4) с порядком  $O(h^2)$ . С другой стороны, решение задачи (2.2) аппроксимирует решение уравнения (1.24) с порядком  $O(dt)$ . Следовательно, решение задачи (2.2) аппроксимирует решение начальной задачи для уравнения с дробной производной по времени с порядком  $O(dt + h^2)$ .

Известно, что точное фундаментальное решение уравнения с дробной

производной по времени в  $R^1$  может быть определено через функции Мейера, [78]. Построим это решение  $W(x,t)$ , используя реализацию функций Мейера в пакете Maple 10, и сравним его с полученным нами решением  $m(x,t)$  задачи (2.2). Графики функций  $W(x,t)$  и  $m(x,t)$  при  $m_0(x) = \delta(x)$  в сравнении представлены на рис.3.9 и рис.3.10 для значений  $t=10$  и  $t=100$ .

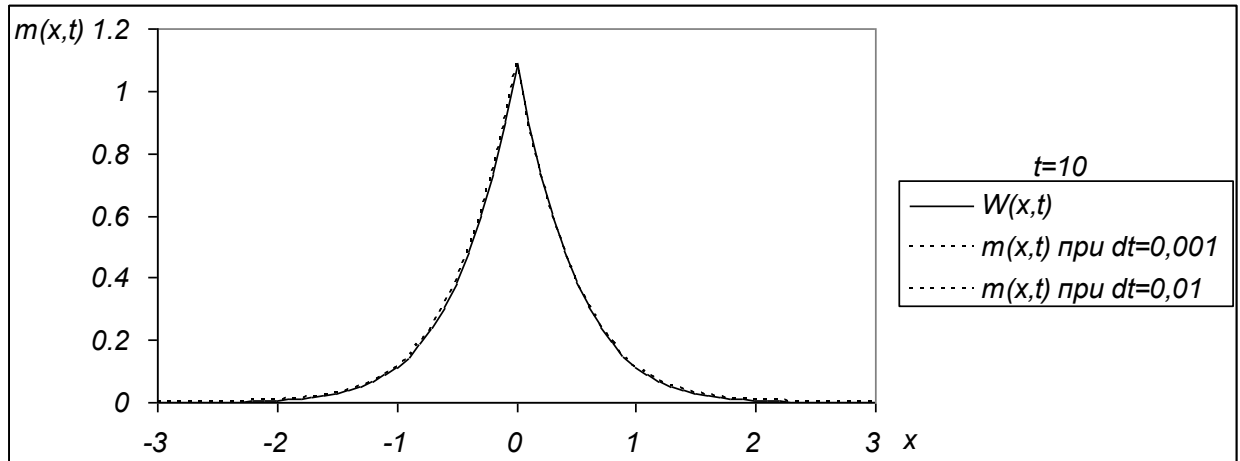


Рис.3.9. Сравнение графиков функций  $W(x,t)$  (решение задачи (П.1.3-П.1.4)) и  $m(x,t)$  (решение задачи (2.2)),  $m_0(x) = \delta(x)$ , для  $t=10$ ,  $dx=0.01$ ,  $\alpha=0.5$ ,  $D_\alpha=0.1$

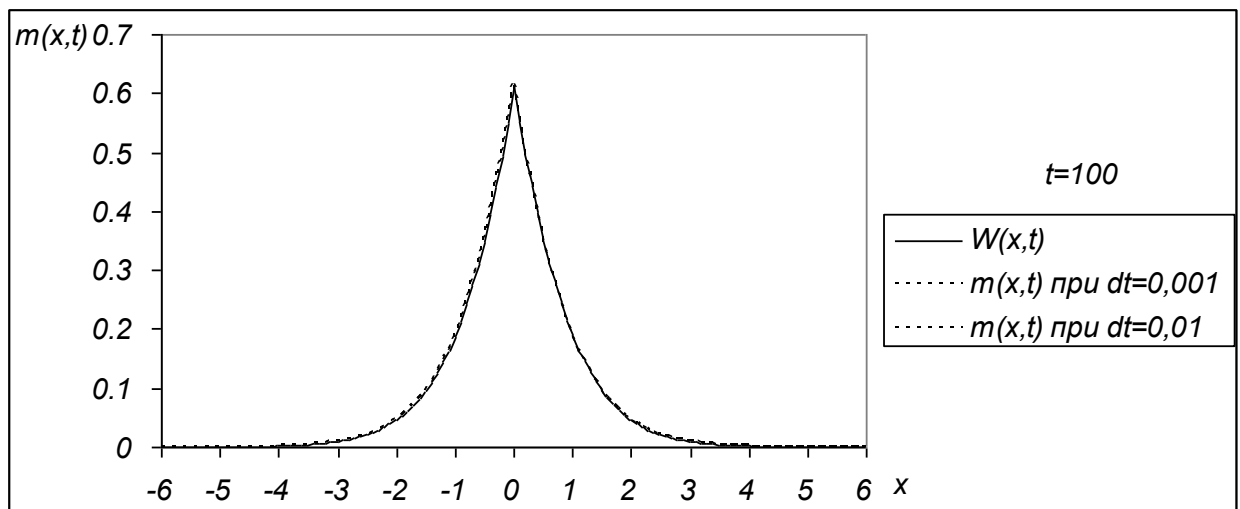


Рис.3.10. Сравнение графиков функций  $W(x,t)$  (решение задачи (П.1.3-П.1.4)) и  $m(x,t)$  (решение задачи (2.2)),  $m_0(x) = \delta(x)$ , для  $t=100$ ,  $dx=0.01$ ,

$$\alpha=0.5, D_\alpha=0.1$$

Соответственно, на рис.3.11 и рис.3.12 приведены графики отклонения функции  $m(x,t)$  от функции  $W(x,t)$  (графики погрешности вычисления).

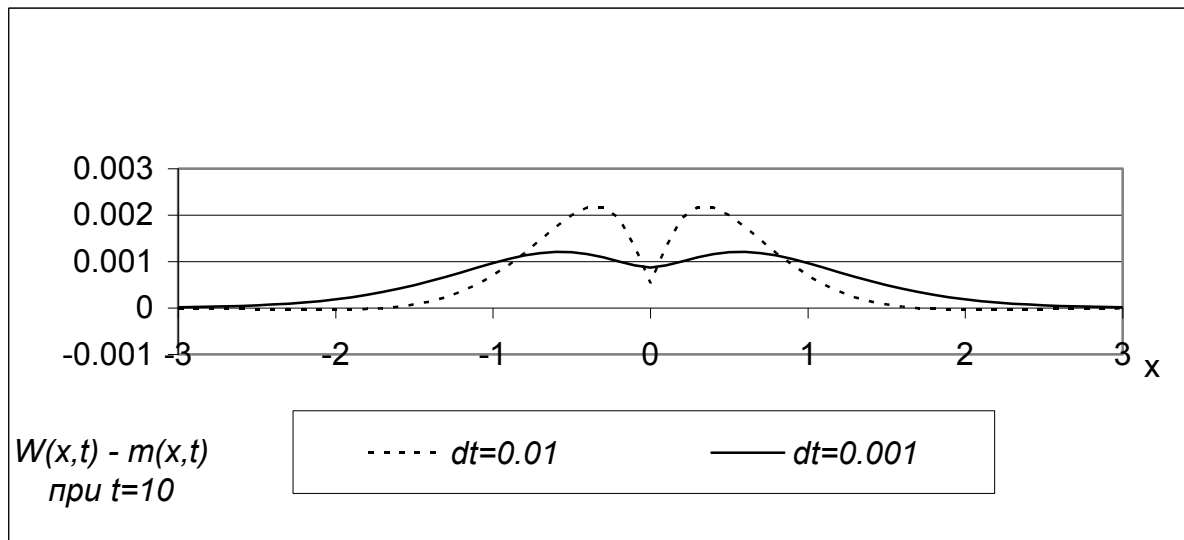


Рис.3.11. Графики отклонения функций  $W(x,t)$  и  $m(x,t)$  при  $t=10$ , представленных на рис.3.9, для  $dt=0.01$  и  $dt=0.001$ . Отклонение имеет порядок  $O(dt)$

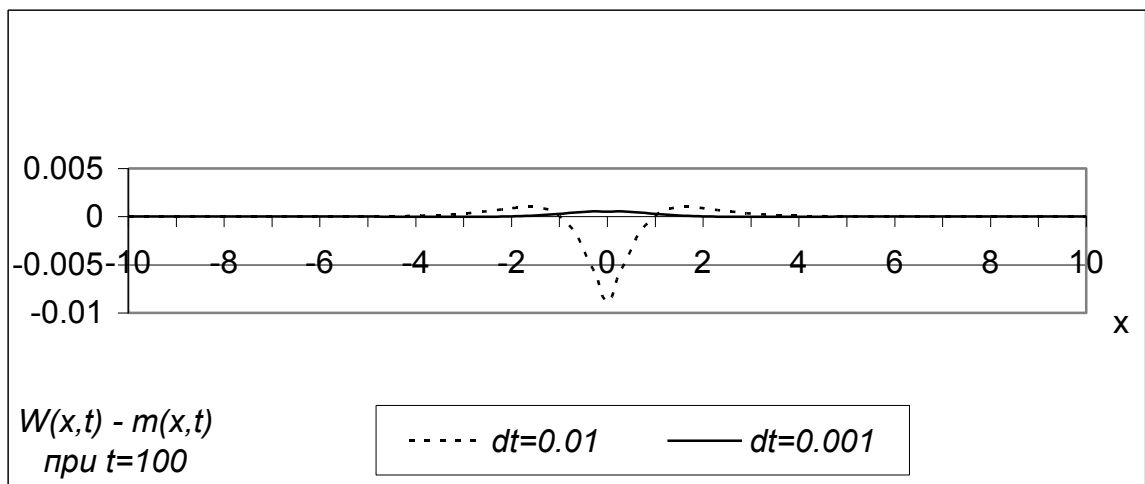


Рис.3.12. Графики отклонения функций  $W(x,t)$  и  $m(x,t)$  при  $t=100$ , представленных на рис.3.10, для  $dt=0.01$  и  $dt=0.001$ . Отклонение имеет порядок  $O(dt)$

Сравним практически полученную погрешность  $\varepsilon_{\text{пр}}$  рассматриваемого метода с теоретически ожидаемой погрешностью  $\varepsilon$ . Погрешность вычислений  $\varepsilon$  должна иметь порядок  $O(dt)$ , по теореме 2.6, п.2.1.



Значения  $\varepsilon_{\text{пр}}$  и  $\varepsilon$  в сравнении для разных  $t$  и  $dt$  при  $h=0.01$  приведены в табл.3.2. В частности, погрешность вычислений для приведенных на рис.3.11 и рис.3.12 графиков имеет ожидаемый порядок  $O(dt)$ .

Таблица 3.2

Сравнение практически полученной погрешности вычислений  $\varepsilon_{\text{пр}}$  с теоретически ожидаемой погрешностью  $\varepsilon$  ( $\varepsilon$  порядка  $O(dt)$ )

| $dt$                                                       |          | 0.1    | 0.01    | 0.001   |
|------------------------------------------------------------|----------|--------|---------|---------|
| среднеквадратическое значение $\varepsilon_{\text{пр}}$    | $t=10$   | 0.0381 | 0.0015  | 0.00094 |
|                                                            | $t=100$  | 0.0445 | 0.0077  | 0.00041 |
|                                                            | $t=1000$ | 0.0496 | 0.0059  | 0.00042 |
| максимальное абсолютное значение $\varepsilon_{\text{пр}}$ | $t=10$   | 0.0537 | 0.00216 | 0.00121 |
|                                                            | $t=100$  | 0.0482 | 0.00889 | 0.00053 |
|                                                            | $t=1000$ | 0.0561 | 0.00789 | 0.00061 |

### Алгоритм вычисления концентрации в $R^2$ .

Пусть субдиффузия начинается в момент времени  $t_0$ , и требуется определить значения функции концентрации на временном интервале  $[t_0, t+t_0]$  как решение начально-краевой задачи (2.12-2.13). Аппроксимируем задачу (2.12-2.13) численной схемой (2.16-2.17) и решаем эту схему следующим образом.

1. Определить общее количество слоев по времени  $N = (t+t_0)/dt$ .

2. Начальные данные для вычисления:

2.1. Если процесс вычисляется с момента времени  $t_0=0$ , то определить значения  $m_{i,j}^0 = m(i,j,0)$  по начальным данным.

2.2. Если процесс вычисляется с момента времени  $t_0 \neq 0$ ,  $t_0 = N_0 dt$ , то

Проверить совпадение заданных параметров субдиффузии и параметров субдиффузии из файла, выбранного для продолжения. Если параметры различаются, выдать сообщение об ошибке.

Скопировать из заданного файла массив значений  $m_{i,j}^n$ , вычисленных на слоях  $n=0, \dots, N_0$  для интервала  $[0, t_0]$ .

3. Определить  $d$  по формуле (2.14), массивы  $C_X$ ,  $C_Y$  по формулам (2.18), (2.20) – общие данные для всех временных слоев.

4. *Определение концентрации.* Цикл по  $n$  от  $[t_0/dt]$  до  $[(t_0+t)/dt]$ ,  $n$  – номер текущего слоя:

4.1. Определить значения  $b_{i,j}^{n-1}$  по всем  $i=0, \dots, I$  и  $j=0, \dots, J$  по формулам (2.14).

2.2. Определить массив коэффициентов  $\varphi_X$  прогонки для определения

слоя  $m_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}$  по формулам (2.18).

3.3. Вычислить значения функции концентрации  $m_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}$  прогонкой по  $i$  по формулам (2.19) (всего  $J$  прогонок).

4.4. Определить массив коэффициентов  $\varphi_Y$  прогонки для определения слоя  $m_{i,j}^n$  по формулам (2.20).

5.5. Вычислить значения функции концентрации  $m_{i,j}^n$  прогонкой по  $j$  по формулам (2.21) (всего  $I$  прогонок).

6.6. Если  $n=N$  стоп (значения концентрации получены в массиве  $m_{i,j}^n$ ).

Иначе переход на шаг 4.1.

5. *Сохранение полученной информации.* Массив концентраций  $m_{i,j}^n$  (значения на всех слоях  $n=0, \dots, N$ ) сохраняется в файл для того, чтобы иметь возможность продолжить вычисление концентрации. Значения

$m_{i,j}^N$  (значения функции концентрации в момент времени  $t+t_0$ ) сохраняются в текстовый файл.

6. Стоп.

### Алгоритм вычисления концентрации в $R^3$ .

Пусть субдиффузия начинается в момент времени  $t_0$ , и требуется определить значения функции концентрации на временном интервале  $[t_0, t+t_0]$  как решение численной схемы (2.26).

1. Определить общее количество слоев по времени  $N = (t+t_0)/dt$ .

2. *Начальные данные для вычисления:*

2.1. Если процесс вычисляется с момента времени  $t_0=0$ , то определить значения  $m_{i,j,k}^0 = m(i,j,k,0)$  по начальным данным.

2.2. Если процесс вычисляется с момента времени  $t_0 \neq 0$ ,  $t_0 = N_0 dt$ , то

Проверить совпадение заданных параметров субдиффузии и параметров субдиффузии из файла, выбранного для продолжения. Если параметры различаются, выдать сообщение об ошибке.

Скопировать из заданного файла массив значений  $m_{i,j,k}^n$ , вычисленных на слоях  $n=0, \dots, N_0$  для интервала  $[0, t_0]$ .

3. Определить  $d$  по формуле (2.23), массивы  $C_x$ ,  $C_y$ ,  $C_z$  по формулам (2.28), (2.30), (2.32) – общие для всех временных слоев.

4. *Определение концентрации.* Цикл по  $n$  от  $[t_0/dt]$  до  $[(t_0+t)/dt]$ ,  $n$  – номер текущего слоя:

4.1. Определить значения  $b_{i,j,k}^{n-1}$  по всем  $i=0, \dots, I$ ,  $j=0, \dots, J$  и  $k=0, \dots, K$  по формулам (2.24).

4.2. Определить массив коэффициентов  $\varphi_x$  прогонки для определения

слоя  $m_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}}$  по формулам (2.28).

Вычислить значения функции концентрации  $m_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}}$  прогонкой по  $i$  по формулам (2.29) (всего  $JK$  прогонок).

Определить массив коэффициентов  $\varphi_Y$  прогонки для определения слоя  $m_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}}$  по формулам (2.30).

Вычислить значения функции концентрации  $m_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}}$  прогонкой по  $j$  по формулам (2.31) (всего  $IK$  прогонок).

Определить массив коэффициентов  $\varphi_Z$  прогонки для определения слоя  $m_{i,j,k}^n$  по формулам (2.32).

Вычислить значения функции концентрации  $m_{i,j,k}^n$  прогонкой по  $k$  по формулам (2.33) (всего  $IJ$  прогонок).

Если  $n=N$  стоп (значения концентрации получены в массиве  $m_{i,j,k}^n$ ) Иначе переход на шаг 4.1.

5. *Сохранение полученной информации.* Массив концентраций  $m_{i,j,k}^n$  (значения на всех слоях  $n=0,\dots,N$ ) сохраняется в файл для того, чтобы иметь возможность продолжить вычисление концентрации. Значения  $m_{i,j,k}^N$  (значения функции концентрации в момент времени  $t+t_0$ ) сохраняются в текстовый файл.

6. Стоп.

В отличие от  $R^1$ , в  $R^2$  и  $R^3$  нет известных решений уравнения (1.24) или каких-либо его аппроксимаций. Поэтому численный анализ точности предложенного алгоритма в  $R^2$  и  $R^3$  затруднен. Тем не менее, заметим, что

уравнение субдиффузии в CTRW-модели (В) в  $R^2$  и  $R^3$  отличается от уравнения субдиффузии в  $R^1$  только

- множителем перед интегралом,
- наличием дополнительных слагаемых под знаком интеграла.

Подстановка другого множителя на точность численной аппроксимации не повлияет, а наличие дополнительных слагаемых под знаком интеграла приведет к дополнительным слагаемым под знаком суммы, аппроксимирующей интеграл, что не изменит порядка погрешности алгоритма. Поэтому, исходя из успешного тестирования алгоритма аппроксимации блуждания в  $R^1$  на фундаментальном решении уравнения субдиффузии, мы считаем этот алгоритм корректным также в  $R^2$  и  $R^3$ .

### 3.4. Сравнение алгоритмов численной реализации субдиффузии

В этом параграфе приводится сравнение времени работы алгоритмов численного моделирования субдиффузии, предложенных в п.3.2-3.3, и оценивается отклонение между функциями концентрации, полученными методами численного решения уравнения субдиффузии и прямого стохастического моделирования.

Теоретическое сравнение эффективности численного моделирования субдиффузии указанными методами дано в п.2.5, (2.38). Практически полученные значения отношения временных затрат  $t_{числ}$  и  $t_{стох}$  методов численного интегрирования и прямого стохастического моделирования, соответственно, при заданной точности моделирования порядка  $\varepsilon=0.01$ , при  $dt=0.01$  и  $S=2 \cdot 10^4$ , вынесены в табл.3.3.

Заданная точность моделирования  $\varepsilon=0.01$  при  $S=2 \cdot 10^4$  соответствует вероятности точности метода прямого стохастического моделирования  $P_0=0,996$ , что следует из (1.47). С этим значением вероятности хорошо

согласуются полученные экспериментальные значения  $P_0=0.996\pm 0.001$ , соответствующие отношению  $\frac{t_{числ}}{t_{стох}}$ , приведенным в табл.3.3.

Таблица 3.3

Значения отношения  $\frac{t_{числ}}{t_{стох}}$  для различных  $\alpha$ .  $T$  – время субдиффузии

| T              | 10        | 50       | 100      | 500         | 1000     |
|----------------|-----------|----------|----------|-------------|----------|
| $\alpha = 0.2$ | 9.5       | 153.1667 | 614.1667 | 11425       | 36892.6  |
| $\alpha = 0.3$ | 7.6       | 114.875  | 460.625  | 6528.571429 | 21081.49 |
| $\alpha = 0.4$ | 6.3333333 | 83.54545 | 263.2143 | 3656        | 10850.76 |
| $\alpha = 0.5$ | 6.3333333 | 70.69231 | 216.7647 | 2470.27027  | 7094.731 |
| $\alpha = 0.6$ | 4.2222222 | 39.95652 | 108.3824 | 1062.790698 | 2904.929 |
| $\alpha = 0.7$ | 2.9230769 | 26.25714 | 65.80357 | 557.3170732 | 1397.447 |
| $\alpha = 0.8$ | 2         | 15.57627 | 37.22222 | 272.8358209 | 644.9755 |

Табл.3.3 показывает, что метод прямого стохастического моделирования, реализованный в соответствии с п.3.2, является более эффективным, чем метод численной аппроксимации интегроразностного уравнения, п.3.3, что полностью соответствует теоретическому сравнению эффективности предложенных методов, данному в п.2.5.

Численный анализ точности методов проведен в п.3.2-3.3. Оценим отклонение между функциями концентрации, полученными методами численного решения уравнения субдиффузии ( $m_{дискр}(\bar{x}, t)$ ) и прямого стохастического моделирования ( $m_{стох}(\bar{x}, t)$ ). Численные эксперименты показывают, что отклонение между функциями концентрации, полученными предложенными методами, не превосходит заданной погрешности моделирования. Значения среднеквадратичного отклонения  $\varepsilon(t)$  функций  $m_{дискр}(\bar{x}, t)$  и  $m_{стох}(\bar{x}, t)$  приведены в табл.3.4.

Таблица 3.4

Значения отклонения  $\varepsilon(t)$  для различных  $\alpha$ . Погрешность моделирования имеет порядок  $O(10^{-3})$ ,  $T$  – время субдиффузии

| $\alpha \backslash T$ | 10     | 50     | 100    | 500    | 1000   |
|-----------------------|--------|--------|--------|--------|--------|
| $\alpha = 0.2$        | 0.0052 | 0.0057 | 0.0062 | 0.0062 | 0.0063 |
| $\alpha = 0.4$        | 0.0051 | 0.0058 | 0.0061 | 0.0062 | 0.0064 |
| $\alpha = 0.6$        | 0.0058 | 0.0061 | 0.0062 | 0.0067 | 0.0068 |
| $\alpha = 0.8$        | 0.0072 | 0.0075 | 0.0078 | 0.0081 | 0.0084 |

### 3.5. Определение среднего квадрата перемещения частиц

В данном параграфе предлагается алгоритм определения среднего квадрата перемещения  $\langle r^2(t) \rangle$  для выборок значений концентрации, полученных разработанными в п.2.1-2.4 численными методами.

Поведение  $\langle r^2(t) \rangle$  для субдиффузии без источников асимптотически при  $t \gg \tau_0$  должно соответствовать условию (1.7) (величина  $\tau_0$  определяется численно в каждой конкретной задаче), а при включении в процесс субдиффузии источников – условию (1.25). Экспериментальное вычисление значений  $\langle r^2(t) \rangle$  позволяет определить, насколько хорошо выбранная функция  $f(t)$  вида (1.19) позволяет имитировать требуемую аномальную субдиффузионную кинетику (1.7).

В программе средний квадрат перемещения определяется:

- для численной аппроксимации решения уравнения субдиффузии (1.24);
- для функции концентрации, определенной методом прямого стохастического моделирования.

1) Определение среднего квадрата перемещения  $\langle r^2(t) \rangle_{\text{дискр}}$  для численной аппроксимации решения уравнения субдиффузии.

Получим выборку  $N$  значений функции  $\langle r^2(t) \rangle_{\text{дискр}}$  при  $t \in [0, t_1]$ ,  $t_1 = Ndt$ .

1. Запускаем алгоритм из п.3.3, полагая  $T=t_1$ , получаем массив концентраций  $m_i^n$ ,  $m_{i,j}^n$ , или  $m_{i,j,k}^n$ .
2. Вычисляем значения  $\langle r^2(ndt) \rangle_{\text{дискр}}$  при  $n=1, \dots, N$  в  $R^3$  по формуле

$$\langle r^2(ndt) \rangle = \sum_{\substack{\text{по всем узлам} \\ \text{сетки } (x_i, y_j, z_k)}} (x_i^2 + y_j^2 + z_k^2) \frac{m_{i,j,k}^n}{M(ndt)}, \quad (3.2)$$

Здесь  $(i,j,k)$  – индексы узлов сетки  $\bar{x}=(x,y,z)$ ,  $M(ndt)$  – общая концентрация в момент времени  $ndt$ ,  $M(ndt) = \sum_{\substack{\text{по всем узлам} \\ \text{сетки } (x_i, y_j, z_k)}} m_{i,j,k}^n$ .

В  $R^1$  и  $R^2$  в формуле (3.2) отсутствуют координаты  $(y,z)$  и  $z$  соответственно.

Для субдиффузии без источников полученное распределение значений среднего квадрата перемещения  $\langle r^2(t) \rangle_{\text{дискр}}$  асимптотически должно соответствовать функции  $\langle r^2(t) \rangle = D_\alpha t^\alpha$ . Обозначим среднеквадратичное значение отклонения этих функций:

$$\varepsilon_{\text{дискр}}(t) = \sqrt{\langle (D_\alpha t^\alpha - \langle r^2(t) \rangle_{\text{дискр}})^2 \rangle}.$$

- 2) Определение среднего квадрата перемещения  $\langle r^2(t) \rangle_{\text{стох}}$  для функции концентрации, определенной методом прямого моделирования.

Получим выборку  $N$  значений функции  $\langle r^2(t) \rangle_{\text{стох}}$  при  $t \in [0, t_1]$ . Цикл по  $n$ ,  $n=1, \dots, N$ :

1. Запускаем алгоритм из п.3.2, полагая  $T=t_1 n/N$ , получаем распределение частиц в момент времени  $T$ , определяем функцию концентрации.
2. По полученной функции концентрации определяем средний квадрат перемещения частиц в момент времени  $T$  по формуле (3.2).

Для субдиффузии без источников полученное распределение значений



среднего квадрата перемещения  $\langle r^2(t) \rangle_{ctox}$  асимптотически должно соответствовать функции  $\langle r^2(t) \rangle = D_\alpha t^\alpha$ . Обозначим среднеквадратичное значение отклонения этих функций:

$$\varepsilon_{ctox}(t) = \sqrt{\langle (D_\alpha t^\alpha - \langle r^2(t) \rangle_{ctox})^2 \rangle}.$$

Поведение отклонений  $\varepsilon_{дискр}(t)$  и  $\varepsilon_{ctox}(t)$ , показано в табл.3.5 для различных  $\alpha$ , при разной погрешности  $\delta$  моделирования субдиффузии. С уменьшением  $\delta$  значения  $\varepsilon_{дискр}(t)$  и  $\varepsilon_{ctox}(t)$  уменьшаются. Таким образом, мы делаем вывод, что выбранная функция  $f(t)$  позволяет хорошо имитировать аномальную кинетику (1.7). Значения  $\tau_0$  в (1.7) определяются для каждой задачи практически. График  $\langle r^2(t) \rangle_{дискр}$  в сравнении с графиком  $\langle r^2(t) \rangle = D_\alpha t^\alpha$  приведен в п.1.3, рис.1.4 ( $\tau_0 \approx 10$ ), графики  $\varepsilon_{дискр}(t)$  приведены на рис.1.5 и рис.1.6.

Таблица 3.5

$$\begin{aligned} &\text{Среднеквадратичные значения отклонений } \varepsilon_{дискр}(t) = \\ &= \sqrt{\langle (D_\alpha t^\alpha - \langle r^2(t) \rangle_{дискр})^2 \rangle} \text{ и } \varepsilon_{ctox}(t) = \sqrt{\langle (D_\alpha t^\alpha - \langle r^2(t) \rangle_{ctox})^2 \rangle}, \end{aligned}$$

вычисленные на интервалах  $t \in (0, T)$ , где  $T$ - время субдиффузии,  $\delta$  - порядок погрешности моделирования субдиффузии

|             |              | $\varepsilon_{дискр}(t)$ |                     |                     | $\varepsilon_{ctox}(t)$ |                     |                     |
|-------------|--------------|--------------------------|---------------------|---------------------|-------------------------|---------------------|---------------------|
| $\alpha$    | $\delta$     | $t \in (0,1)$            | $t \in (0,10)$      | $t \in (0,100)$     | $t \in (0,1)$           | $t \in (0,10)$      | $t \in (0,100)$     |
| <b>0,25</b> | <b>0.01</b>  | $5.3 \cdot 10^{-2}$      | $2.1 \cdot 10^{-3}$ | $1.8 \cdot 10^{-3}$ | $6.1 \cdot 10^{-2}$     | $2.9 \cdot 10^{-3}$ | $1.8 \cdot 10^{-3}$ |
|             | <b>0.001</b> | $4.4 \cdot 10^{-3}$      | $2.2 \cdot 10^{-4}$ | $1.5 \cdot 10^{-4}$ | $5.9 \cdot 10^{-3}$     | $2.4 \cdot 10^{-4}$ | $1.9 \cdot 10^{-4}$ |
| <b>0,5</b>  | <b>0.01</b>  | $2.2 \cdot 10^{-2}$      | $4.8 \cdot 10^{-3}$ | $1.2 \cdot 10^{-3}$ | $2.1 \cdot 10^{-2}$     | $5.7 \cdot 10^{-3}$ | $1.8 \cdot 10^{-3}$ |
|             | <b>0.001</b> | $3.5 \cdot 10^{-3}$      | $2.1 \cdot 10^{-4}$ | $1.3 \cdot 10^{-4}$ | $3.8 \cdot 10^{-3}$     | $7.6 \cdot 10^{-4}$ | $4.6 \cdot 10^{-4}$ |
| <b>0,75</b> | <b>0.01</b>  | $5.3 \cdot 10^{-2}$      | $1.8 \cdot 10^{-3}$ | $1.6 \cdot 10^{-3}$ | $6.4 \cdot 10^{-2}$     | $2.0 \cdot 10^{-3}$ | $1.9 \cdot 10^{-3}$ |
|             | <b>0.001</b> | $6.7 \cdot 10^{-3}$      | $2.3 \cdot 10^{-4}$ | $1.4 \cdot 10^{-4}$ | $7.1 \cdot 10^{-3}$     | $2.4 \cdot 10^{-4}$ | $2.0 \cdot 10^{-4}$ |

### 3.6. Программа для построения траекторий стохастического блуждания частиц

Программа предназначена для построения траекторий стохастического блуждания частицы в модели субдиффузии (В) в  $R^1$ - $R^2$  в соответствии с системой аксиом (В), построенные траектории можно сохранить в файл.

Для блуждания задаются следующие параметры: показатель аномальности  $\alpha$ , шаг частицы  $h$ , коэффициент диффузии  $D_\alpha$  и время процесса. Диалоговое окно программы приведено на рис.3.13.

Блуждание частиц представляет собой реализацию прямой стохастической имитационной модели субдиффузии, предложенной в п.2.4.

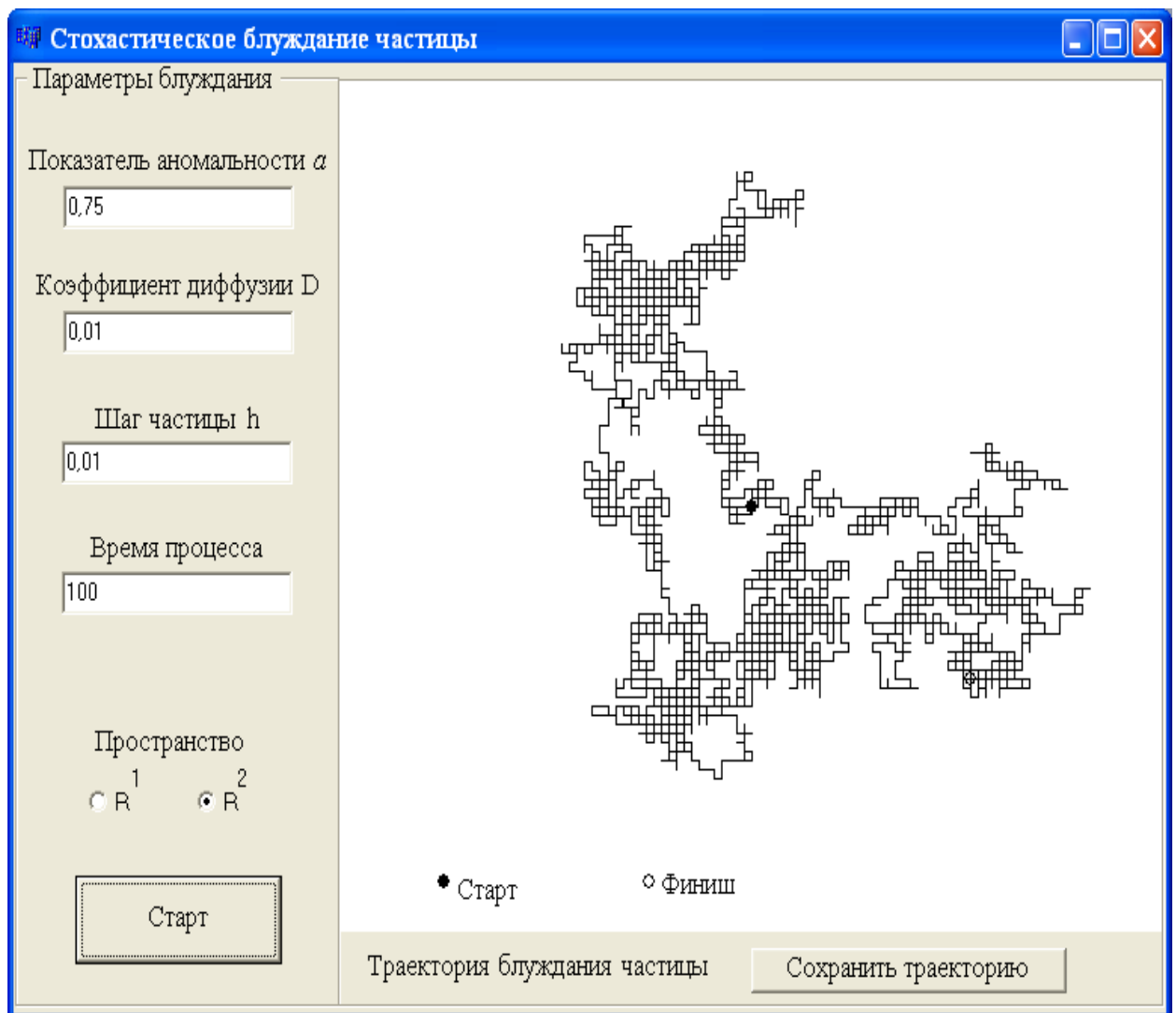


Рис.3.13. Диалоговое окно программы построения траекторий

## ГЛАВА 4. STRW-МОДЕЛИРОВАНИЕ СУБДИФФУЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ПОРИСТЫХ СРЕДАХ ДРОБНОЙ РАЗМЕРНОСТИ

Известно, [3,11,21,58], что процессы диффузии в средах с поровым пространством дробной размерности  $d_f$  с ненулевой связностью  $\theta$  обладают свойством  $\langle r^2(t) \rangle \sim D_\alpha t^{\frac{2}{2+\theta}}$ ,  $t \gg 0$ , т.е. являются субдиффузионными. Примерами сред с поровым пространством дробной размерности  $d_f$  являются уголь ( $d_f = 1.94 \div 3.03$ ), графит ( $d_f \approx 2.07$ ), торф ( $d_f = 2.47 \div 2.96$ ), песчаник ( $d_f = 2.07 \div 2.87$ ), [3,21]. В этой главе показано, что построенная STRW-модель субдиффузии на евклидовых решетках применима для моделирования таких процессов.

В п.4.1 устанавливается свойство асимптотической эквивалентности функции концентрации, определяемой процессом субдиффузии в средах с поровым пространством дробной размерности и ненулевой связности, и функции концентрации, определяемой STRW-моделью (В) блуждания частиц на евклидовой решетке, в которой при постоянном шаге блуждания плотность вероятности задержки частицы в узлах решетки удовлетворяет условию (1.16). *Это позволяет нам предложить новую имитационную модель процесса субдиффузии в поровом пространстве дробной размерности.*

В п.4.2 показано, как на основе построенной в п.4.1 имитационной модели субдиффузии определяется во времени ширина диффузионного пакета в зависимости от связности порового пространства.

В п.4.3 на основе STRW-модели перколяционного процесса в поровом пространстве  $F$  заданной сеточной размерности определены значения показателя аномальности и параметра связности на пороге протекания; получены оценки параметра связности, при которых на  $F$  возможен перколяционный процесс; получены оценки показателя аномальности для процесса протекания и оценка величины связности этого порового пространства.

В заключение главы, в п.4.4 приводятся результаты исследования

процесса Сопа, который в ряде работ, [20,84], используется для моделирования фрактального броуновского движения (ФБД). Показано, что процесс Сопа представляет собой случайный процесс, отличный от ФБД. В частности, приращения процесса Сопа обладают менее сильными корреляциями, чем приращения ФБД, и дисперсия процесса Сопа постоянна, в отличие от дисперсии ФБД, которая удовлетворяет условию (1.7).

Результаты этой главы опубликованы в [27,29,34,36-40].

#### **4.1. Моделирование субдиффузии в поровом пространстве дробной размерности CTRW-моделью субдиффузии на евклидовой решетке**

В этом параграфе рассматривается задача моделирования субдиффузии в поровом пространстве дробной размерности с ненулевой связностью субдиффузией на евклидовых решетках в CTRW-модели.

Прямое стохастическое моделирование процесса блуждания в поровом пространстве  $F$  дробной размерности наталкивается на следующие трудности. Пусть  $n$  – число шагов частицы на сеточном множестве  $F_N$ , аппроксимирующим  $F$  (здесь аппроксимация  $F_N \rightarrow F$  понимается в  $N \rightarrow \infty$  смысле метрики Хаусдорфа на компактных подмножествах, [20]). Тогда в зависимости  $n(N)$  числа шагов от порядка аппроксимации  $N$  диффузию можно локализовать или, наоборот, ускорить. Действительно, если частица, например, делает шаг, после чего происходит переход к сеточному множеству следующего порядка, то диффузия может локализоваться в первоначальной или соседней ячейке для всех  $t > 0$ . Наоборот, если порядок аппроксимации  $N$  зафиксирован, то мы получим диффузию на регулярной решетке евклидова пространства, и закон (1.7) нарушится.

*Единственным физическим законом, формирующим связь  $n(N)$ , на наш взгляд, является закон роста среднего квадрата перемещения частиц в зависимости от времени:  $\langle r^2(t) \rangle \sim D_\alpha t^\alpha$ ,  $t > 0$ , где величина  $\alpha$  будет*

уточнена ниже. А именно, с ростом порядка аппроксимации  $N$  и соответствующего числа шагов  $n(N)$  должно выполняться соотношение  $\frac{\langle r^2(t) \rangle}{D_\alpha t^\alpha} \sim 1$ . Но аналитически зависимость  $n(N)$  не определена, что и является препятствием для прямого стохастического моделирования диффузии в поровом пространстве дробной размерности. Численные реализации блуждания построены лишь для некоторых регулярных фрактальных множеств, [1,7,23,24,69,82,83,86,94], но мотивации выбора соотношения  $n(N)$  авторами этих работ не указаны.

В данном параграфе блуждание в поровом пространстве дробной размерности с ненулевой связностью моделируется блужданием на евклидовой решетке шага  $h$  с плотностью вероятности задержки  $f(t)$  так, что вместо численного регулирования  $n(N)$  осуществляется выбор зависимости функции  $f(t)$  от  $h$ , обеспечивающей выполнение условия  $\frac{\langle r^2(t) \rangle}{D_\alpha t^\alpha} \sim 1$  при  $t \gg 0$ .

Введем необходимые определения.

**Определение 4.1**, [11]. Пусть  $N_n(\varepsilon)$  – минимальное число  $n$ -мерных  $\varepsilon$ -кубов, покрывающих множество  $F \subset \mathbb{R}^n$ ,  $n \geq 2$ . Сеточной размерностью множества  $F$  называют величину

$$d_f = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln N_n(\varepsilon)}{-\ln \varepsilon}. \quad (4.1)$$

Для самоподобных и самоаффинных множеств эта размерность совпадает с фрактальной и хаусдорфовой размерностями, [20,56]. Для подмножеств, имеющих топологическую размерность  $m \leq n$ ,  $d_f = m$ .

**Определение 4.2**, [11]. Минимальная размерность  $d_f$  образов пути минимальной размерности  $\gamma: P_1 \rightarrow P_2$ , соединяющего произвольные точки  $P_1$  и  $P_2$ , находящиеся в общем положении на  $F$  (т.е. соединяемых в  $F$  некоторым

путем  $\gamma$ ), при всевозможных гомеоморфизмах  $f$ , обозначим через

$$d_\theta = \inf_{f:\gamma \rightarrow \gamma'} \inf_{\gamma} d_f[\gamma: P_1 \rightarrow P_2]. \quad (4.2)$$

Согласно [11], величина  $d_\theta$  имеет смысл сеточной размерности «геодезических» линий на  $F$  (путей минимальной размерности, позволяющих обойти все внутренние пустоты), рис.4.1. На регулярных множествах  $f \subset R^n$ ,  $d_\theta=1$ . На фракталах, в общем случае,  $d_\theta \geq 1$ .

Введем, [11], индекс  $\theta$  связности множества  $F$  как величину

$$\theta = 2(d_\theta - 1), \quad (d_\theta = 1 + \frac{\theta}{2}). \quad (4.3)$$

**Определение 4.3.**, [11]. Спектральной размерностью множества  $F$  назовем величину

$$d_s = \frac{d_f}{d_\theta} = \frac{2d_f}{2 + \theta}. \quad (4.4)$$

Иначе говоря, спектральная размерность есть отношение сеточной размерности множества к сеточной размерности его «геодезических» линий.

Рассмотрим случайное блуждание частицы по множеству  $F$  дробной размерности. Следуя работам [11,49], свяжем асимптотическую зависимость среднего квадрата отклонения от времени с геометрической характеристикой связности множества  $F$ .

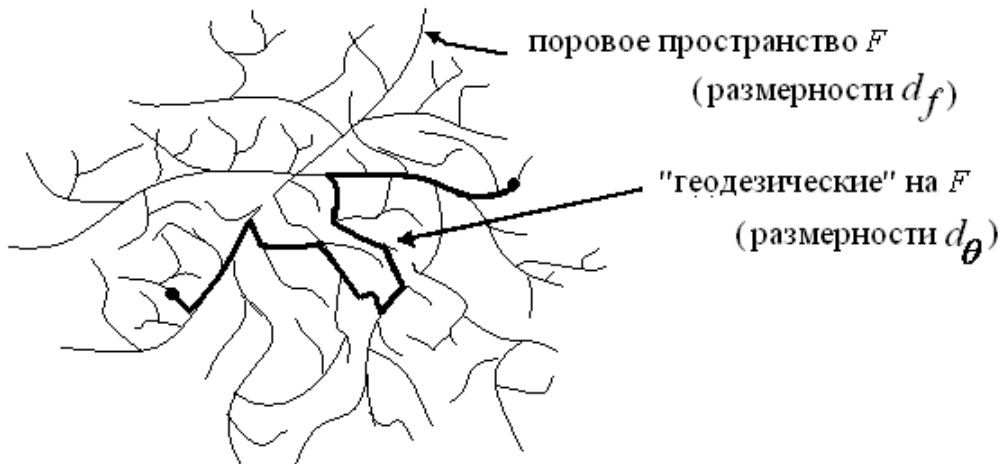


Рис.4.1. «Геодезическая» линия на множестве  $F$ .

Пусть частица начинает блуждать по  $F$  из начала координат в момент времени  $t=0$ . Тогда, [11,49], средний квадрат удаления частицы от начала координат растет при  $t \gg 0$  как

$$\langle r^2(t) \rangle \sim D_\alpha t^\alpha, \quad \alpha = \frac{d_s}{d_f} = \frac{2}{2+\theta} = \frac{1}{d_\theta}. \quad (4.5)$$

Это выражение было впервые получено из анализа перколяционных кластеров в работе [70] и использовалось в ряде работ, [11,21,48,56,65]. Из (4.5) следует, что значение  $\alpha$  зависят только от индекса связности  $\theta$  множества  $F$ , и не зависят от размерности  $d_f$  этого множества.

Величина  $\alpha$  является инвариантным относительно гомеоморфизмов  $\gamma$  параметром, (4.2), характеризующим, согласно [11], топологию  $F$ . Таким образом, нелинейный рост среднего квадрата перемещения в процессе выравнивания концентрации на множестве  $F$  определяется топологическим инвариантом  $\theta$  этого множества.

Под *функцией концентрации частиц, сосредоточенных на  $F$* , будем понимать отношение величины множества частиц к единице евклидова объема, содержащего соответствующую порцию  $F$ .

Ранее, п.1.3, (1.16), было установлено, что в рамках CTRW-модели соотношение (4.5) реализуется в случае постоянного шага на евклидовой решетке для класса  $\mathcal{P}$  плотностей вероятности задержки  $f(t)$ , обладающих свойством (1.16). При этом, согласно доказанному нами утверждению 1.25, все концентрации  $p(\bar{x}, t)$ , соответствующие всевозможным функциям  $\tilde{f}(s)$  со свойством (1.16), определяются однозначно по этим  $\tilde{f}(s)$  и начальным концентрациям  $p_0$ , и эквивалентны между собой при  $t \gg 0$ .

Теперь вернемся к моделированию субдиффузии в поровом пространстве  $F$  дробной размерности ненулевой связности  $\theta$ . Накроем  $F$  евклидовой решеткой с шагом  $h$ , рис.4.2.а. Каждая ячейка полученной решетки содержит некоторую порцию  $F$ , на которой сосредоточены частицы, рис.4.2.б. Тогда частицы, сосредоточенные на  $F$ , определяют функцию концентрации частиц,

сосредоточенных в ячейках решетки, и процесс блуждания частиц на  $F$  моделируется блужданием частиц по ячейкам. Чтобы это блуждание частиц по ячейкам могло быть описано в рамках построенной в п.1.3 CTRW-моделью (В) субдиффузии на евклидовой решетке, сделаем следующее предположение, уточняющее способ перемещения частиц.

*Перемещение частицы происходит мгновенно в одну из соседних ячеек после задержки на некоторое случайное время.*

Для того чтобы описанный процесс блуждания удовлетворял условию аномальности (1.7), функция плотности вероятности задержки в ячейке должна подчиняться условию (1.16).

На основании этого приходим к следующему выводу.

**Вывод 4.4.** Функция концентрации  $p(\bar{x}, t)$  с начальным условием  $p(\bar{x}, 0) = p_0(\bar{x})$ , описывающая процесс субдиффузии на множестве  $F \subset R^n$  дробной размерности с индексом связности  $\theta > 0$ , при  $t \gg 0$  эквивалентна функции концентрации с тем же начальным условием, определяемой CTRW-моделью (В) блуждания частиц, в которой при постоянном шаге блуждания  $h$  плотность вероятности задержки  $f(t)$  удовлетворяет условию (1.16) при  $\alpha = 1/d_\theta$  и может быть взята в виде (1.19).

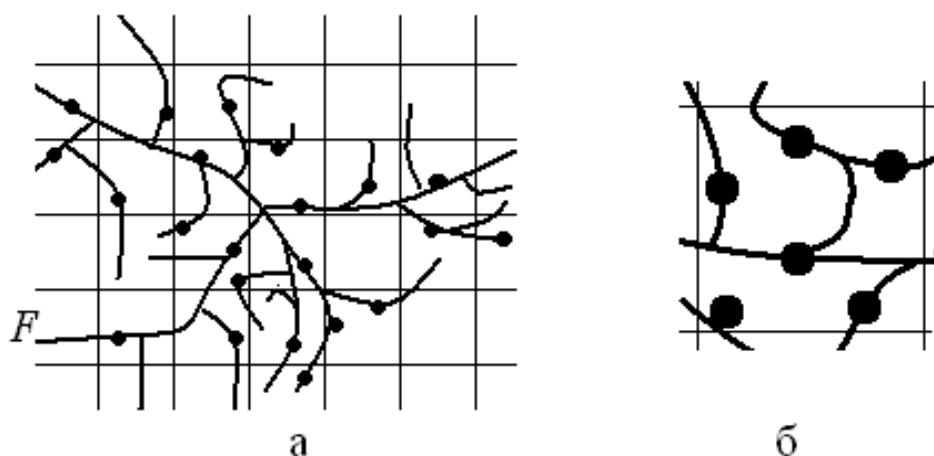


Рис.4.2. а) Разбиение множества  $F$  евклидовой решеткой;  
б) одна из ячеек разбиения



Таким образом, построенная CTRW-модель субдиффузии на евклидовой решетке с постоянным шагом и функцией задержки  $f(t)$  установленного вида, (1.16), позволяет имитировать процесс субдиффузии в поровом пространстве  $F$  дробной размерности со связностью  $\theta > 0$ .

#### 4.2. Определение ширины диффузионного пакета для процесса субдиффузии в поровом пространстве дробной размерности

В случае диффузии, описываемой уравнением

$$\frac{\partial p(\bar{x}, t)}{\partial t} = D \Delta p(\bar{x}, t),$$

начальное распределение концентрации  $p(\bar{x}, 0)$  и условие линейного роста среднего квадрата перемещения

$$\langle r^2(t) \rangle = Dt \quad (4.6)$$

однозначно определяют функцию концентрации  $p(\bar{x}, t)$  для всех  $t > 0$ .

В случае аномальной диффузии вместо условия (4.6) для всех  $t > 0$  выполняется условие (1.7) при  $t \gg 0$ , и для заданной начальной концентрации  $p(\bar{x}, 0)$  процесс диффузии в CTRW-модели определяется асимптотически однозначно, по утверждению 1.25.

На основании построенной в п.4.1 имитационной модели мы можем определить зависимость ширины субдиффузионного пакета от времени по связности  $\theta$  порового пространства  $F$  дробной размерности;

Пусть блуждание происходит в поровой среде  $F$  дробной размерности с некоторой связностью  $\theta$ . Шириной субдиффузионного пакета называют, [50], величину  $\sqrt{\langle r^2(t) \rangle}$ . Напомним, что  $\langle r^2(t) \rangle$  определяется для субдиффузии без источников по формуле (1.7), для субдиффузии с источниками – по полученной нами в п.1.4 формуле (1.25) Выражение (1.25) получено нами впервые. Имитационная модель п.4.1 при наличии источников впервые позволяет наблюдать зависимость ширины диффузионного пакета от

времени в процессе субдиффузии с источниками. Соотношения (1.7), (1.25) позволяют определить ширину субдиффузионного пакета, если известны значения  $\alpha$ ,  $D_\alpha$ . Численное определение  $\langle r^2(t) \rangle$  описано в п.3.5.

#### 4.3. Оценки параметров перколяционных процессов на основе CTRW-модели

Одним из примеров аномальных диффузионных процессов являются процессы протекания, или *перколяционные процессы*, [47,65,70,72,85]. Под перколяцией понимается случайное *нелокализуемое* распространение диффундирующего вещества в фоновой среде, причем понятия диффундирующего вещества и среды интерпретируются по-разному в соответствии с физическим смыслом задачи. Примерами могут служить диффузия растворимого вещества в растворителе, распространение заболевания деревьев или пожара в лесу, просачивание жидкости или газа сквозь пористую среду со сложной структурой. *Все эти задачи сводятся к задаче блуждания частиц некоторой среды на фоновой среде дробной размерности*, [3,7,9,21-24,56,58], и в силу вывода 4.4 допускают CTRW-моделирование с определенной функцией задержки.

В этом параграфе показано, как для имитационной CTRW-модели перколяционного процесса определяются следующие соотношения между основными параметрами субдиффузионного процесса:

1. значения величин  $\alpha$  и  $\theta$  на пороге протекания;
2. оценка сеточной размерности  $d_f$  среды, на которой имеет место перколяционный процесс с заданным показателем  $\alpha$ ;
3. наименьшее возможное значение показателя  $\alpha$  для перколяционного процесса в поровой среде заданной сеточной размерности  $d_f$ ;
4. оценки параметра связности среды  $\theta$ , в которой имеет место

перколяционный процесс при заданной сеточной размерности  $d_f$  либо заданной спектральной размерности  $d_s$ .

Рассмотрим перколяцию (протекание, или просачивание) в поровом пространстве  $F$  дробной размерности с ненулевой связностью, вложенном в  $R^n$ ,  $n=1,2,3$ . Перколяция предполагает существование некоторого *порога протекания*, [11,47], ниже которого распространение диффундирующего вещества *локализуется*, т.е. ограничивается конечной областью среды  $F$ , рис.4.3.а.

Достижение порога протекания происходит, когда величина спектральной размерности  $d_s$  достигает некоторого критического значения. Значение спектральной размерности  $d_s$  на пороге протекания одинаково для всех  $2 \leq n \leq 5$ , и равно  $C \approx 1,327$ , [11,47]. Эта величина  $C$  называется «*постоянной протекания*». При значениях  $d_s$  меньше порогового значения  $C$  «концентрация пор» в  $F$  мала, и происходит локализация диффузионного процесса, рис.4.3.а. Для значений  $d_s$ , больших порогового значения  $C$ , «концентрация пор» становится достаточной для того, чтобы частицы прошли «насквозь» через всю среду  $F$ , рис.4.3.б.



Рис.4.3.а) При  $d_s < C$  концентрация пор среды мала, и происходит локализация диффузионного процесса. Траектория частицы показана жирной линией.

б) При  $d_s > C$ , концентрация пор становится достаточной для протекания

Для того, чтобы на  $F$  мог иметь место перколяционный процесс, сеточная размерность  $d_f$  должна удовлетворять условиям, [21],

$$d_f \geq 1.90 \text{ в } R^2,$$

$$d_f \geq 2.54 \text{ в } R^3.$$

На основании изложенного, решим сформулированные выше четыре задачи.

1) Определим значения величин  $\alpha$  и  $\theta$  на пороге протекания. Подставляя значения спектральной и сеточной размерностей на пороге протекания в формулу (4.5), определяем  $\alpha$ :

$$\alpha \approx 0.698 \text{ в } R^2,$$

$$\alpha \approx 0.522 \text{ в } R^3.$$

Подставляя полученные значения  $\alpha$  в (4.7), определяем  $\theta$ :

$$\theta \approx 0.863 \text{ в } R^2,$$

$$\theta \approx 1.828 \text{ в } R^3.$$

2) Формула (4.5) позволяет оценить сеточную размерность  $d_f$  среды, в которой имеет место перколяционный процесс с заданным показателем  $\alpha$ :

$$d_f \geq \frac{C}{\alpha}.$$

3) Используя полученную оценку и (4.5), можно определять допустимые значения показателя  $\alpha$  в процессе протекания. Если задано значение спектральной размерности  $d_s$ , то для перколяционного процесса

$$\alpha \leq \frac{d_s}{1.90} \text{ в } R^2 \quad \text{и} \quad \alpha \leq \frac{d_s}{2.54} \text{ в } R^3.$$

С другой стороны,

$$\alpha \geq \frac{C}{d_f}.$$

4) Определим значения параметра связности  $\theta$  порового пространства  $F$ , при которых на  $F$  возможен перколяционный процесс. Пусть поровое

пространство  $F$  имеет сеточную размерность  $d_f$ . Тогда из условия (4.5) получаем:

$$\theta = 2\left(\frac{d_f}{d_s} - 1\right), \quad (4.8)$$

и, так как значение спектральной размерности  $d_s$  множества  $F$  не меньше порогового значения  $C$ , то имеем оценку

$$\theta \leq 2\left(\frac{d_f}{C} - 1\right). \quad (4.9)$$

С другой стороны, если задана спектральная размерность  $d_s$  множества  $F$ , то

$$\theta \geq 2\left(\frac{1.90}{d_s} - 1\right) \text{ в } R^2 \quad \text{и} \quad \theta \geq 2\left(\frac{2.54}{d_s} - 1\right) \text{ в } R^3.$$

*Вывод. Для представления перколяционных процессов CTRW-моделью (В) субдиффузии на евклидовой решетке определены допустимые значения основных параметров субдиффузии и размерностей поровой среды на пороге протекания.*

#### **4.4. Об одной численной реализации фрактального броуновского движения**

В заключение работы приведем результаты исследования одной модели аномальной диффузии, которое и явилось причиной постановки ряда задач, сформулированных во введении.

Исследование моделей аномальной диффузии нами началось с численного моделирования фрактального броуновского движения (ФБД), результаты которого изложены в [10, 36-40].

А.П. Ковалевским в [10] установлено, что модель Сопа спектрального синтеза ФБД дает процесс с постоянной дисперсией. Следовательно, эта модель неприменима для численной реализации ФБД. В мою задачу входило подтверждение этого факта с помощью численных экспериментов. Для

изложения результатов приведем необходимые определения.

**Определение 4.5**, [20]. Гауссовский процесс  $X(t)$  при  $t \in [0, T]$  называется *фрактальным броуновским движением* с параметром  $H$ , если:

1.  $X(0) = 0$  и функция  $X(t)$  почти всегда непрерывна.
2. Случайная величина  $\Delta X = X(t_2) - X(t_1)$ ,  $t_2 > t_1$ , имеет гауссовское распределение с математическим ожиданием  $M=0$  и дисперсией

$$D = \langle (X(t_2) - X(t_1))^2 \rangle = \sigma^2 |t_2 - t_1|^{2H}, \quad \forall t_2, t_1 \in [0, T],$$

где  $\sigma$  – положительная константа,  $0 < H < 1$ .

Этот процесс является стационарным и статистически самоподобным:

$$X(t + \Delta t) - X(t) = \frac{1}{k^H} [X(t + k\Delta t) - X(t)], \quad \forall k > 0, \forall \Delta t. \quad (4.10)$$

ФБД с параметром  $H=1/2$  совпадает с классическим броуновским движением. Как и классическое броуновское движение, ФБД почти наверное недифференцируемо, доказательство этого факта дано Мандельбротом и Ван Нессом в [76].

В отличие от классического броуновского движения, приращения которого независимы, ФБД не обладает этим свойством. Приращения  $X(t)$  независимы тогда и только тогда, когда  $H=1/2$ , более того, ФБД имеет бесконечно большое время корреляции. Коэффициент корреляции приращений ФБД определяется, [56], по формуле

$$r_T = \frac{1}{2} ((T+1)^{2H} + (T-1)^{2H} - 2T^{2H}), \quad (4.11)$$

где  $T$  – расстояние между приращениями.

В случае  $H > 1/2$  коэффициент корреляции между соседними приращениями положителен и возрастает при возрастании  $H$ . Это означает сохранение тенденций, т.е. *персистентность* процесса. Графики процесса в этом случае имеют достаточно большие участки с тенденцией возрастания либо убывания, рис.4.4. Случай  $H < 1/2$  характеризуется *антиперсистентностью* – коэффициент корреляции между соседними приращениями отрицателен и убывает при убывании  $H$ . В этом случае графики процесса сильно

«изрезаны», см. рис.4.5. Блуждание частиц по закону ФБД в антиперсистентном случае является субдиффузионным процессом.

Для ФБД траектории частиц являются локально неспрямляемыми, [76], и представляют собой фрактальные множества размерности  $(n+1-H)$  в  $R^n$ .

Наиболее известными моделями ФБД являются модель стохастических интегралов Б.Мандельброта и Ван-Несса, [76], численная модель случайных сложений Р.Фосса, [93], и численная модель спектрального синтеза Д.Сопа, [84]. Известно, [20] что метод Фосса, как и его многочисленные модификации, дает фрактальные траектории, не обладающие основными свойствами ФБД: закон дисперсии (1.7) выполняется только для приращений специального вида и отсутствует стационарность приращений процесса. Метод дискретизации стохастического интеграла Мандельброта и Ван-Несса для получения выборки ФБД из  $N$  элементов требует порядка  $O(N^2)$  умножений. Метод Сопа требует  $N \cdot \log_2 N$  умножений, и казался наиболее перспективным

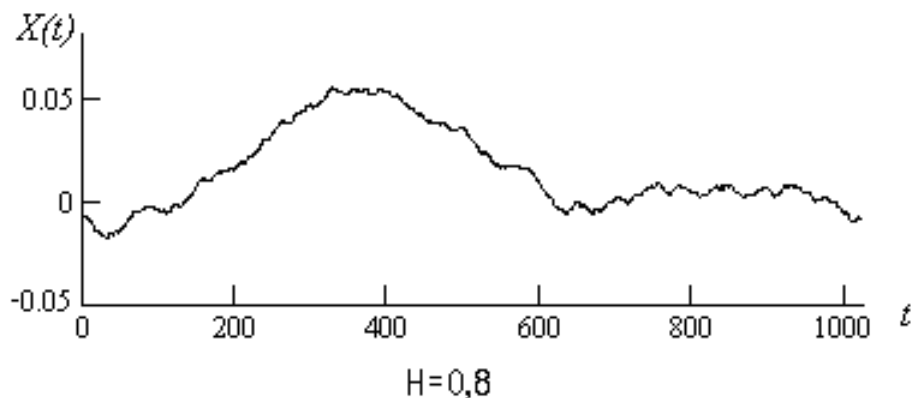


Рис.4.4. Траектория ФБД  $X(t)$  при  $H=0.8$  – персистентный процесс

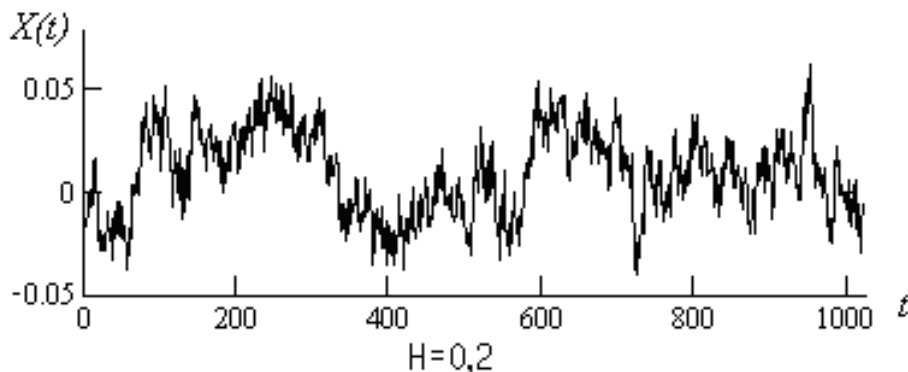


Рис.4.5. Траектория ФБД  $X(t)$  при  $H=0.2$  – антиперсистентный процесс

для численного моделирования ФБД. Изложим его подробно.

Отметив, что коэффициенты  $\hat{X}(k)$  разложения ФБД в ряд Фурье

$$X\left(\frac{n}{N}\right) = \sum_{k=1}^{N-1} \hat{X}(k) \cdot e^{2\pi i k n / N}$$

должны в среднем убывать со скоростью  $k^{-2H-1}$ , то есть обладать свойством

$$\langle |\hat{X}(k)|^2 \rangle \propto k^{-2H-1}, \quad k \rightarrow \infty, \quad (4.12)$$

Д. Соп, [84], предложил принять их равными

$$\begin{cases} \hat{X}(k) = \frac{g_k}{k^{H+0.5}} e^{2\pi i u_k}, & k = 1, \dots, \frac{N}{2} - 1; \\ \hat{X}\left(\frac{N}{2}\right) = 0; \\ \hat{X}(k) = \overline{\hat{X}(N-k)}, & k = \frac{N}{2} + 1, \dots, N-1. \end{cases}$$

Здесь  $g_k$ ,  $u_k$  – случайные величины со стандартным нормальным и равномерным на отрезке  $[0,1]$  распределением соответственно. Все введенные случайные величины предполагаются независимыми в совокупности. Условие комплексной сопряженности  $\hat{X}(k) = \overline{\hat{X}(N-k)}$  требуется для того, чтобы значения процесса  $X(n/N)$  были действительными.

Тогда процесс Сопы  $X(n/N)$  определяется, [10], соотношением

$$\begin{aligned} X\left(\frac{n}{N}\right) &= \sum_{k=1}^{N/2-1} \frac{g_k}{k^{H+0.5}} e^{2\pi i u_k} e^{2\pi i k n / N} + \\ &+ \sum_{k=N/2+1}^{N-1} \frac{g_{N-k}}{(N-k)^{H+0.5}} e^{2\pi i u_{N-k}} e^{2\pi i (N-k) n / N} = \\ &= 2 \sum_{k=1}^{N/2-1} \frac{g_k}{k^{H+0.5}} \cos\left(2\pi \left(u_k + \frac{kn}{N}\right)\right), \quad n=1, \dots, N. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Обратное преобразование Фурье (4.13) требует порядка  $O(N^2)$  умножений, что совпадает со сложностью метода Мандельброта, но для метода Сопы возможно использование быстрого обратного преобразования Фурье,  $N \cdot \log_2 N$



умножений. Стохастические свойства процесса Сопа изучены нами теоретически и подтверждены моделированием, [10, 36-40]. Показано, что процесс, порождаемый алгоритмом Сопа, *не обладает* фундаментальными свойствами ФБД.

Во-первых, различные методы оценки параметра  $H$  (метод среднеквадратичных отклонений, метод нормированного размаха) показали отклонение параметра  $H$  построенной выборки от параметра  $H$ , задаваемого при моделировании, [36,38-40]. В табл.4.1 показана погрешность алгоритма Сопа.

Таблица 4.1

Среднеквадратичные отклонения параметров  $H$  выборок процесса Сопа от параметра  $H$ , задаваемого при моделировании процесса с  $N$  приращениями

| $N \setminus H$ | 0.1     | 0.3     | 0.5     | 0.7     | 0.8     | 0.9     |
|-----------------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|
| 1024            | 0,16087 | 0,09049 | 0,05315 | 0,03762 | 0,03132 | 0,05006 |
| 4096            | 0,15040 | 0,08023 | 0,04449 | 0,0222  | 0,02426 | 0,03558 |
| 8192            | 0,15565 | 0,09352 | 0,04935 | 0,02857 | 0,01462 | 0,04697 |
| 16384           | 0,15344 | 0,09058 | 0,05045 | 0,02349 | 0,01354 | 0,01634 |

Из табл.4.1 видно, что метод спектрального синтеза лучше работает при построении персистентных процессов. Наименьшие погрешности наблюдались при построении ФБД с  $0.75 < H < 0.8$ . При этом для значений  $H$ , не превышающих  $\sim 0.5$ , наблюдались отклонения только в большую сторону.

Во-вторых, метод пересечений нуля фрактальным гауссовским шумом, [10], показывает, что вероятность  $p_H$  перемены знака приращениями процесса Сопа для разных значений  $H$  отличается от теоретических значений вероятности  $\tilde{p}_H$  перемены знака для ФБД, рис.4.6.

В-третьих, дисперсия приращений ФБД должна удовлетворять условию аномальности  $\langle X_n^2 \rangle \propto n^{2H}$  (следует из определения ФБД), а для дис-

персии приращений процесса Сопа обнаружено  $\langle X_n^2 \rangle \propto 2 \sum_{k=1}^{N/2-1} \frac{1}{k^{2H+1}}$ ,

т. е.  $\langle X_n^2 \rangle \approx const$ .

В-четвертых, корреляционная функция  $r_T$  приращений для процесса Сопа, [10],

$$r_T = \frac{\sum_{k=1}^{N/2-1} \frac{1}{k^{2H+1}} \sin^2 \frac{2\pi k}{N} \cos \frac{4\pi k T}{N}}{\sum_{k=1}^{N/2-1} \frac{1}{k^{2H+1}} \sin^2 \frac{2\pi k}{N}},$$

где  $T$  – расстояние между приращениями, отличается от корреляционной функции приращений ФБД, заданной формулой (4.11).

**Вывод.** Процесс Сопа представляет собой стационарный случайный процесс, отличный от ФБД. Его приращения обладают менее сильными корреляциями, чем приращения ФБД. Фактически, метод спектрального синтеза не позволяет эффективно моделировать ФБД, оказывается хуже метода Фосса, и для моделирования ФБД остается только одна корректная модель – модель Мандельброта и Ван Несса. Вопрос о возможности подбора частот  $\hat{X}(k)$  так, чтобы восстановленный процесс представлял собой ФБД, остается открытым. Более того, возникает главный вопрос: по каким характеристикам процесс аномальной диффузии моделируется корректно, и каковы физические посылки такой модели? Поиски ответа на этот вопрос и привели нас к постановке задач данного диссертационного исследования.

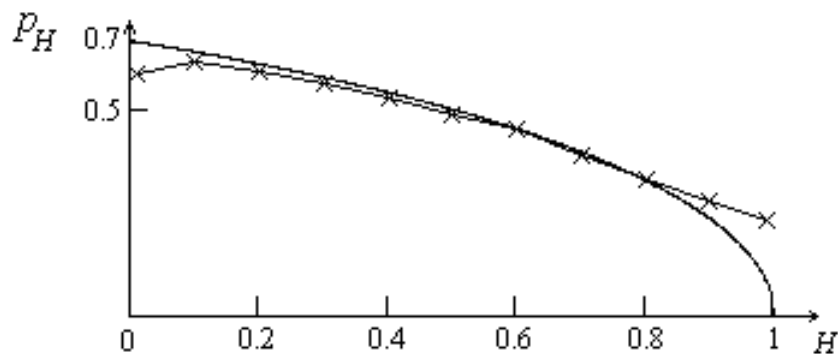


Рис.4.6. Сравнение графиков  $r_H$  для процесса Сопа и  $\tilde{r}_H$  для ФБД. Сплошной линией показан график  $\tilde{r}_H$ , линией с крестиками показан график  $r_H$

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В соответствии с поставленными целями исследований получены следующие основные результаты.

1. Построена CTRW-модель субдиффузии на евклидовых решетках в  $R^n$  ( $n=1,2,3$ ). Для нее выведено интегроразностное уравнение, для которого доказана теорема существования и единственности решения.
2. Для CTRW-модели субдиффузии на евклидовых решетках построен такой класс функций плотности вероятности задержки, что все функции концентрации, соответствующие этим плотностям и удовлетворяющие одному и тому же начальному условию, эквивалентны при  $t \gg 0$  (асимптотическая единственность).
3. Разработаны методы численного решения интегроразностного уравнения субдиффузии на евклидовых решетках в  $R^n$  ( $n=1,2,3$ ), с использованием экономичных численных схем.
4. Разработан метод прямого стохастического моделирования субдиффузии на евклидовых решетках в  $R^n$  ( $n=1,2,3$ ), и показано, что функция концентрации, полученная в результате этого метода, при увеличении количества блуждающих частиц сходится по вероятности к решению уравнения субдиффузии на евклидовых решетках.
5. Построена имитационная CTRW-модель субдиффузионного процесса на множестве дробной размерности с ненулевой связностью, и указаны ее возможные применения.
6. Разработан комплекс программ для решения следующих задач:
  - численная реализация субдиффузии на евклидовых решетках в  $R^n$ ,  $n=1,2,3$ , методом прямого стохастического моделирования;
  - численная реализация субдиффузии с источниками и без источников на евклидовых решетках в  $R^n$ ,  $n=1,2,3$ , методом дискретизации уравнения субдиффузии с построением экономичных схем;

- определение зависимости среднего квадрата перемещения частиц в процессе субдиффузии с источниками от времени и построение траекторий перемещения частицы.

В приложение 1 вынесены следующие сопутствующие результаты:

1. Установлены необходимые и достаточные условия, при которых CTRW-модель субдиффузии описывается начальной задачей для неоднородного дифференциального уравнения с дробной производной по времени. На основании этих условий среди множества формальных начально-краевых задач для дифференциального уравнения с дробной производной по времени выделены те задачи, которые имеют физический смысл в рамках CTRW модели, а именно описывают процесс субдиффузии.
2. Разработаны два новых метода численного решения дифференциального уравнения субдиффузии с дробной производной по времени:
  - метод аппроксимации интегроразностного оператора, приближающего начальную задачу для дифференциального уравнения;
  - метод, основанный на прямом стохастическом моделировании субдиффузии.

**СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ**

1. Архинчеев В.Е. Случайное блуждание по иерархическим гребешковым структурам / ЖЭТФ. – 1999, т.115, в.4. – с.1285-1296.
2. Бахвалов Н.С. численные методы / М.: Наука – 1975 – 632с.
3. Булат А.Ф., Дирда В.И. Фракталы в геомеханике / К.: Наукова думка, 2005. – 357 с.
4. Ван Кампен Н.Г. Стохастические процессы в физике и химии / М.: Высшая школа, 1990. – 380 с.
5. Владимиров В.С. Уравнения математической физики / М.: Наука. – 1981. – 512 с.
6. Годунов С.К. Рябенский В.С. Разностные схемы (введение в теорию). М.:Наука 1973. – 400с.
7. Гольдштейн Р.В., Мосолов А.Б. Фрактальные трещины / Прикладная математика и механика. – 1992, т. 56, № 4. – с. 663-671.
8. Деч Г. Руководство к практическому применению преобразования Лапласа и Z-преобразования / М.: Наука. – 1971. – 288 с.
9. Динариев О.Ю. Фильтрация в трещиноватой среде с фрактальной геометрией трещин / Механика жидкости и газа. – 1990, №5. – с. 66-70.
10. Закревская Н.С., Ковалевский А.П., Селезнева [Пехтерева] Л.В. Процесс Сопы / Научный вестник НГТУ. – 2004, №3(18), – с.13-19.
11. Зеленый Л.М., Милованов А.В. Фрактальная топология и странная кинетика: от теории перколяции к проблемам космической электродинамики / УФН. – 2004, т. 174, № 8. – с. 809-852.
12. Золотарев В.М. Одномерные устойчивые распределения / М.: Наука, 1983. – 304с.
13. Золотарев В.М., Учайкин В.В., Саенко В.В. Супердиффузия и устойчивые законы/ ЖЭТФ. – 1999, т. 115,– с. 1411-1425.
14. Зосимов В.В., Лямшев Л.М. Фракталы в волновых процессах / УФН. – 1997, т. 165, № 4. – с. 361-401.

15. Кобелев В.Л., Кобелева О.Л., Кобелев Я.Л., Кобелев Л.Я. О диффузии через фрактальную поверхность / ДАН. – 1999, т. 355, №3, – с. 326-327.
16. Кобелев Я.Л., Кобелев Л.Я., Романов Е.П. Автоволновые процессы при нелинейной фрактальной диффузии / ДАН. – 1999, т.369, №3, – с. 332-333.
17. Кобелев В.Л., Романов Е.П., Кобелев Я.Л., Кобелев Л.Я. Недебаевская релаксация и диффузия в фрактальном пространстве / ДАН. – 1998, т. 361, №6, – с. 755-758.
18. Кобелев В.Л., Романов Е.П., Кобелев Я.Л., Кобелев Л.Я. Релаксационные и диффузионные процессы во фрактальных пространствах / Изв. Акад. Наук. – 1998, т. 62, №12. – с. 2401-2408.
19. Кокс Д.Р., Смит В.Л. Теория восстановления / М.: Сов. радио, 1967. – 300 с.
20. Кроновер Р.М.. Фракталы и хаос в динамических системах. Основы теории. / Москва. Постмаркет. – 2000. – 352с.
21. Кулак М.И. Фрактальная механика материалов / Мн.: Выш. шк., 2002. – 304 с.
22. Мальшаков А.В. Уравнения гидродинамики для пористых сред со структурой порового пространства, обладающей фрактальной геометрией / Инженерно-физический журнал. – 1992, т. 62, № 3. – с. 405-410.
23. Мосолов А.Б., Динариев О.Ю. Фракталы, скейлы и геометрия пористых материалов / ЖТФ. – 1988, т. 58, в. 2. – с. 233-238.
24. Мосолов А.Б., Динариев О.Ю. Фрактальные модели пористых сред / ЖТФ. – 1987, т. 57, в. 9. – с. 1679-1685.
25. Нахушев А.М. Дробное исчисление и его применение / М.:Физматлит. – 2003. – 272с.
26. Нигматуллин Р.Р. Дробный интеграл и его физическая интерпретация / ТМФ.– 1992, т.90, №3 – с.354-368.
27. Пехтерева Л.В. Моделирование блуждания на множествах дробной размерности в рамках STRW-модели / НАУКА. ТЕХНОЛОГИИ.

- ИННОВАЦИИ. Материалы всероссийской научной конференции молодых ученых. Часть 1. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2007. – с.142-145.
28. Пехтерева Л.В. О сохранении дисперсных свойств аномальной кинетики в случае степенных источников / НАУКА. ТЕХНОЛОГИИ. ИННОВАЦИИ. Материалы всероссийской научной конференции молодых ученых в 7-ти частях. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2006. Часть 1. – с.188-189.
29. Пехтерева Л.В. STRW-имитирование субдиффузионных процессов на фрактальных множествах / Сборник научных трудов НГТУ. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2007, № 4(50). – с. 63-68.
30. Пехтерева Л.В., Селезнев В.А. Источники в STRW-модели субдиффузии / Современные проблемы теоретической и прикладной механики: тезисы докладов Всероссийского семинара, Новосибирск, 10-12 апреля 2007г. – Новосибирск: НГАСУ (Сибстрин). – 2007. – стр. 66-67.
31. Пехтерева Л.В., Селезнев В.А. Модель субдиффузии с фиксированной длиной пробега частиц при наличии источников. // Сборник НГАСУ (Сибстрин). – Новосибирск. – 2007. – с. 27-31.
32. Саичев А.И., Уткин С.Г. Модели дробной диффузии / Актуальные проблемы статистической радиофизики. – 2002, т. 1, № 1. – с. 5-43.
33. 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.
34. Селезнев В.А., Пехтерева Л.В. О численных реализациях субдиффузионного процесса переноса / Научный вестник НГТУ. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2006, № 4(25). – с.155-166.
35. Селезнев В.А., Селезнева [Пехтерева] Л.В. К вопросу о численной реализации субдиффузионного процесса переноса / Тезисы докладов 63-й научно-технической конференции – НГАСУ (Сибстрин). – Новосибирск. – 2006. – с. 66-67.

36. Селезнева [Пехтерева] Л.В. К вопросу моделирования обобщенного броуновского движения / НАУКА. ТЕХНИКА. ИННОВАЦИИ. Региональная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых: тез. докл. в 5-ти частях. Новосибирск: Изд-во НГТУ. – 2002, Часть 1. – с. 215-216.
37. Селезнева [Пехтерева] Л.В. К вопросу о реализации фрактальным броуновским движением динамики курсов акций / Сборник научных трудов НГТУ. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2005, № 1(39). – с. 151-154.
38. Селезнева [Пехтерева] Л.В. Метод пересечения нуля для модели случайных фаз построения ФБД / Сборник научных трудов НГТУ. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2004, № 4(38). – с.35-40.
39. Селезнева [Пехтерева] Л.В. Метод случайных фаз построения обобщенного броуновского движения / НАУКА. ТЕХНОЛОГИИ. ИННОВАЦИИ. Мат. докл. всероссийской научной конференции молодых ученых в 6-ти частях. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2003. Часть 1. – с. 237-239.
40. Селезнева [Пехтерева] Л.В. Метод случайных фаз построения ФБД / Сборник научных трудов НГТУ. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2004, № 1. – с. 49-54.
41. Селезнева [Пехтерева] Л.В. О преобразовании уравнения с дробной производной по времени к интегроразностному уравнению / Сборник научных трудов НГТУ. – 2005, № 3(41). – с. 53-58.
42. Селезнева [Пехтерева] Л.В. Об аппроксимации интегроразностного уравнения субдиффузии / НАУКА. ТЕХНОЛОГИИ. ИННОВАЦИИ. Материалы всероссийской научной конференции молодых ученых. Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2005. Часть 1. – с. 282-283.
43. Селезнева [Пехтерева] Л.В. Численное моделирование процесса субдиффузии / Сборник научных трудов НГТУ. – 2006, № 1(43). – с. 99-104.
44. Селезнева [Пехтерева] Л.В. Численное моделирование процесса



- субдиффузии в  $R^2$  и  $R^3$  / Сборник научных трудов НГТУ. – 2006, № 3(45). – с.43-48.
45. Сибатов Р.Т., Учайкин В.В. Дробно-дифференциальная кинетика переноса заряда в неупорядоченных полупроводниках / ФТП. – 2007, т. 41, вып.3, с.346-351.
  46. Сибатов Р.Т., Учайкин В.В. Одномерное фрактальное блуждание с конечной скоростью свободного движения / Письма в ЖТФ. – 2004, т.30, – с. 27-33.
  47. Смирнов Б.М. Физика фрактальных кластеров / М.: Наука, 1991.– 136 с.
  48. Соболев С.Л. Локально-неравновесные модели процессов переноса / УФН. – 1997, т.167, №10. – с. 1095-1106.
  49. Соколов И.М. Размерности и другие геометрические критические показатели в теории протекания / УФН. – 1986, т. 150, в. 2. – с. 221-255.
  50. Учайкин В.В. Автомодельная аномальная диффузия и устойчивые законы / УФН. – 2003, т. 173, №. 8. – с. 847-876.
  51. Учайкин В.В.. Аномальный перенос частиц с конечной скоростью и асимптотическая фрактальность / ЖТФ. – 1998, т. 68, №1.– с. 138-139.
  52. Учайкин В.В. Субдиффузия и устойчивые законы / ЖЭТФ. – 1999, т. 115, в. 6. – с. 2113-2132.
  53. Учайкин В.В. К теории аномальной диффузии частиц с конечной скоростью свободного движения / Теор. и мат. физика, – 1998. т.115, №1. – с.154-160.
  54. Учайкин В.В. Фрактальные блуждания и блуждания на фракталах / ЖТФ. – 2004, т.74, в.7. – с.123-126.
  55. Учайкин В.В., Саенко В.В. К теории классической мезодиффузии/ ЖТФ. – 2001, т. 71, №2.– с. 8-15.
  56. Федер Е., Фракталы,; пер. с англ. - М.:Мир. - 1991. - 254 с.
  57. Феллер В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения. Том 2. Пер. с англ.: Прохоров Ю.В. / М.: Мир. – 1967. –752 с.

58. Фракталы в физике: Труды VI международного симпозиума по фракталам в физике, МЦТФ, Триест, Италия, 9-12 июня, 1985: пер. с англ. / под ред. Л. Пьетронеро, Э. Тозатти. – М.: Мир, 1988. – 672 с.
59. Чукбар К.Б. Стохастический перенос и дробные производные / ЖЭТФ. 1995, т.108. – с. 1875-1884.
60. Шхануков М. Х. О сходимости разностных схем для дифференциальных уравнений с дробной производной / ДАН. 1996, т.348. – с. 746-748.
61. Шхануков-Лафишев М. Х., Нахушева Ф.М. Краевые задачи для уравнения диффузии дробного порядка и сеточные методы их решения / Неклассические уравнения математической физики. – Новосибирск: изд-во ИМ СО РАН – 1998. – с. 37-44.
62. Baeumer B., Meerschaert M.M., Mortensen J. Space-time fractional derivative operators / Proc. Am. Math. Soc. – 2005, vol. 133 – p.1-10.
63. Barkai E., Metzler R., Klafter J. From continuous time random walks to the fractional Fokker-Planck equation / Phys.Rev.E. – 2000, vol. 61 – p.132-138.
64. Ben-Avraham D., Havlin S. Diffusion and Reactions in Fractals and Disordered Systems / London: Cambridge University press. – 2000 – 312p.
65. Ben-Avraham D., Havlin S. Diffusion on percolation clusters at criticality / J. Phys. A. – 1982, vol. 15. – p. L691-L697.
66. Blumen A., Klafter J., White B.S., Zumofen G. Continuous-Time Random Walks on Fractals / Phys. Rev. Lett –1984, vol.53, №14. – p.1301-1304.
67. Bouchaud J.P., Georges A. Anomalous diffusion in disordered media/ Phys. Rep. – 1990, vol. 195. – p. 127-287.
68. Compte A. Stochastic foundations of fractional dynamics / Phys. Rev. E. – 1996, vol. 53, №4. – p.4191-4193.
69. Fabio D.A., Aarao Reis. Diffusion on regular fandom fractals / J. Phys. A. – 1996, vol. 29. – p. 7803-7810.
70. Gefen Y., Aharony A. Alexander S. Anomalous diffusion on percolating clusters / Phys. Rev. Lett. – 1983, vol. 50, №1. – p. 77-80.
71. Given J.A., Mandelbrot B.B. Diffusion on fractal lattices and the fractal

- Einstein relation / J. Phys. B. – 1983, vol. 16. – p. L565-L569.
72. Hilfer R. Transport and relaxation phenomena in porous media / Advances in Chem. Physics. – 1996, vol.XCII. – p. 299-424.
  73. Klafter J., Blumen A., Shlesinger M.F. Stochastic pathway to anomalous diffusion / Phys. Rev. A. – 1987, vol 35, №7. – p. 3081-3085.
  74. Klafter J., Silbey R. Derivation of the Continuous-Time Random-Walk Equation / Phys. Rev. Lett. – 1980, vol.44, №2. – p.55-58.
  75. Liuy F., Shen S., Anhy V., Turner I. Analysis of a discrete non-Markovian random walk approximation for the time fractional diffusion equation / Phys. Rep.– 2004, vol. 398. – p.253-259.
  76. Mandelbrot B.B. Van Ness J.W. Fractional Brownian Motions, Fractional Noises and Applications / SIAM Review. – 1968, vol.10, №4. – p. 422-437.
  77. Metzler R., Klafter J. Subdiffusive transport close to thermal equilibrium: From the Langevin equation to fractional diffusion / Phys. Rev. E. – 2000 vol.61, №6. – p.6308-6311.
  78. Metzler R., Klafter J. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach / Phys. Rep. – 2000, vol. 339. – p. 1-77.
  79. Metzler R., Klafter J., Sokolov I.M. Anomalous transport in external fields: Continuous time random walks and fractional diffusion equations extended / Phys. Rev. E – 1998, vol.58, №2, – p.1621-1633.
  80. Montroll E.W., Weiss G.H. Random walks on lattices. II./ J. Math. Phys. – 1965, vol. 6, №2 – p. 167-181.
  81. Montroll E.W., Shlesinger M.F. The wonderful world of random walks / Stud. Stat. Mech. – 1984, vol.11.
  82. O'Shaughnessy B., Procaccia I. Analytical Solutions for Diffusion on Fractal Objects / Phys. Rev. Lett – 1985, vol.54, №5, – p.455-458.
  83. O'Shaughnessy B., Procaccia I. Diffusion on fractals / Phys. Rev. A. – 1985, vol. 32, №5. – p. 3073-3083.
  84. Peitgen H.-O., Saupe D. Ed. The Science of Fractal Images / Springer-

Verlag, New York -1988.

85. Pfister G., Scher H. Dispersive (non-Gaussian) transient transport in disordered solids. – Adv. Phys. – 1978. – V.27. – N.5. – p.747-798.
86. Rammal R., Toulouse G. Random walks on fractal structures and percolation clusters / J. Physique - Lettres. – 1983, vol. 44. – p. L-13 - L-22.
87. Scher H., Lax M. Stochastic Transport in a Disordered Solid. I. Theory / Phys. Rev. B – 1973, vol. 7, №10. – p. 4491-4502.
88. Scher H., Lax M. Stochastic Transport in a Disordered Solid. II. Impurity Conduction / Phys. Rev. B – 1973, vol.7, №10. – p. 4502-4519.
89. Scher H., Montroll E.W. Anomalous transit-time dispersion in amorphous solids. – Phys. Rev. B. – 1975, vol.12, N.6.– p.2455-2477.
90. Scher H., Shlesinger M.F. , Bendler J.T. Time-scale invariance in transport and relaxation. – Physics Today – 1991. – January – p.26-34.
91. Selezneva [Pehtereva] L.V. The Stochastic Model of Approximation of the Solution of Subdiffusion Equation / Proceed. 9-th Russian-Korean International Symposium on Science and Technology KoRus 2005, 26.06.05-02.07.05 – p.100-103.
92. Uchaikin V.V. Montroll-Weiss Problem, Fractional Equations and Stable Distributions / Int. J. Theor. Phys. – 2000, vol. 39. – p. 2087-2105.
93. Voss R.F. Random fractal forgeries. In: Fundamental algorithms in Computer Graphics / 1985, Springer-Verlag, Berlin. – p.805-835.
94. Weiss G.H., Havlin S. Some properties of a random walk on a comb structure / Physica A. – 1986, vol.134. – p. 474-482.
95. Wyss W. The fractional diffusion equation. – J. Math. Phys. – 1986. – V.27. – N.11. – p. 2782-2785.
96. Zaslavsky G.M., Saichev A.I. Fractional kinetic equations: solutions and applications / Chaos. – 1997, vol.7, № 4. – p. 753-764.
97. Zumofen G., Klafter J. Scale-invariant motion in intermittent chaotic systems / Phys. Rev.E. – 1993. – V.47.– p. 851-863.

**ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ СУБДИФфуЗИИ**

### П.1.1. Мотивация исследования дифференциальной модели

В этом приложении выводится необходимое и достаточное условие, при котором интегральное уравнение (1.23), описывающее субдиффузию, эквивалентно начальной задаче для дифференциального уравнения с дробной производной по времени. На основании этого результата предложены два численных метода решения уравнения с дробной производной по времени, описывающего субдиффузию. Первый метод связан с аппроксимацией интегроразностного оператора, приближающего начальную задачу для дифференциального уравнения. Вторым методом основан на прямой стохастической реализации модели (В) п.1.5. Результаты, полученные в приложении, опубликованы в [41,91].

Методы численного решения дифференциальных уравнений с дробной производной по времени, основанные на применении разностей дробного порядка, рассматривались ранее в работах [25,60-61,75]. Однако дифференциальные модели в монографии [25], реализуемые оператором дробного дифференцирования по времени с показателем  $\alpha \in (0,1)$ , не содержат случая субдиффузии в рамках CTRW-модели. Что касается работ [60,75], то они, как и [25], относятся к случаю диффузии в  $R^1$ . Отметим, что точность и сложность рассмотренных в этих работах приближенных методов в  $R^1$  эквивалентны точности и сложности методов, предложенных в п.П.1.4-П.1.5. Более того, мы считаем, что предлагаемые нами методы более физичны, так как реализуются в рамках CTRW-модели, которая включает все известные нам случаи обычной и аномальной диффузии. Физичность CTRW-модели состоит в том, что через плотности вероятности задержки  $f(t)$  и скачка  $\lambda(\bar{x})$ ,  $\bar{x} \in R^n$ ,  $n=1,2,3$ , вычисляется коэффициент диффузии как коэффициент пропорциональности среднего квадрата перемещения дробной степени времени, а также концентрация на любой момент времени при заданной начальной концентрации.

### П.1.2. Реализация CTRW-модели субдиффузии дифференциальным уравнением

Начальные задачи для уравнения с дробной производной по времени без правой части рассматривались в ряде работ, [25,75] и др. В этом параграфе будет показано, что процесс субдиффузии, связанный с задержками частиц, приводит к появлению правой части в дифференциальном уравнении. На основании этого заключаем, что дифференциальные уравнения с дробной производной по  $t \in (0,1)$  без правой части не являются реализациями процесса аномальной диффузии.

В работах [50], [73] были получены достаточные условия в терминах трансформант функций  $f(t)$  и  $\lambda(x)$ , при выполнении которых плотность вероятности  $p(x,t)$  является решением дифференциального уравнения с дробной производной по  $t$ . Однако, постановки начально-краевых задач, решения которых восстанавливают  $p(x,t)$ , там не изучались.

В этом параграфе будет показано, как процессы субдиффузии, описываемые CTRW моделью, могут быть описаны начальной задачей для дифференциального уравнения с дробной производной по времени, эквивалентной интегральному уравнению (1.23). Это позволяет нам выделить среди множества формальных начально-краевых задач для уравнения в дробной производной по  $t$  те, которые физичны, т.е. имеют механический смысл хотя бы в рамках CTRW модели.

Нам потребуются следующие основные определения, [5], [33].

**Определение П.1.1**, [33]. Для функции  $\varphi(y)$ , заданной на отрезке  $[a,b]$ , каждое из выражений

$$(D_{a+}^{\alpha}\varphi)(y) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dy} \int_a^y \frac{\varphi(u)du}{(y-u)^{\alpha}}, \quad y > a$$

$$(D_{b-}^{\alpha}\varphi)(y) = -\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dy} \int_y^b \frac{\varphi(u)du}{(u-y)^{\alpha}}, \quad y < a$$

называется дробной производной Римана–Лиувилля порядка  $\alpha$ ,  $0 < \alpha < 1$ ,

соответственно левосторонней и правосторонней.

**Утверждение П.1.2**, [33]. Пусть  $\varphi(y)$  - абсолютно непрерывная на  $[a, b]$  функция. Тогда функция  $\varphi(y)$  имеет почти всюду производные  $D_{a+}^{\alpha}\varphi$  и  $D_{b-}^{\alpha}\varphi$ ,  $0 < \alpha < 1$ , причем  $D_{a+}^{\alpha}\varphi$  и  $D_{b-}^{\alpha}\varphi \in L_q(a, b)$ ,  $1 \leq q < 1/\alpha$ .

**Определение П.1.3**, [33]. Для функции  $\varphi(y)$ , заданной на отрезке  $[a, b]$ , выражения

$$(I_{a+}^{\alpha}\varphi)(y) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \frac{d}{dy} \int_a^y \frac{\varphi(u) du}{(y-u)^{1-\alpha}}, \quad y > a,$$

$$(I_{b-}^{\alpha}\varphi)(y) = -\frac{1}{\Gamma(\alpha)} \frac{d}{dy} \int_y^b \frac{\varphi(u) du}{(u-y)^{1-\alpha}}, \quad y < b,$$

называются интегралами Римана–Лиувилля дробного порядка  $\alpha$ ,  $0 < \alpha < 1$ , соответственно левосторонним и правосторонним.

Дробные интегралы определены  $\forall \varphi(y) \in L_1(a, b)$ , и существуют почти всюду, [33].

Введем обобщенную функцию  $f_{\alpha}$  из  $D'_+$ ,  $\alpha$  – вещественный параметр:

$$f_{\alpha}(x) = \begin{cases} \frac{\theta(x)}{\Gamma(\alpha)} x^{\alpha-1}, & \alpha > 0, \\ f'_{\alpha+1}, & \alpha \leq 0, \end{cases}$$

где  $\theta(x)$  – функция Хевисайда,  $\theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x \leq 0. \end{cases}$

**Определение П.1.4**. Сверточный оператор  $f_{\alpha}^*$  в алгебре  $D'_+$  называют оператором дробного дифференцирования по  $x$  порядка  $\alpha$  при  $\alpha < 0$  и дробного интегрирования по  $x$  при  $\alpha > 0$ , обозначим их соответственно  $D_{b-}^{-\alpha}$  и  $I_{b-}^{\alpha}$ .

Преобразование Лапласа дробной производной порядка  $\alpha$  обобщенной функции  $g(t)$  вычисляется с использованием утверждений 1.5, 1.16, 1.21, 1.22:

$$L(I_{0+}^{\alpha}g) = L(f_{\alpha}^*g) = s^{-\alpha}L[g], \quad 0 < \alpha < 1, \quad s = \sigma + i\omega. \quad (\text{П.1.1})$$



$$L(D_{0+}^{\alpha} g) = L(I_{0+}^{-\alpha} g) = s^{\alpha} L[g] - I_{0+}^{1-\alpha} g(0), \quad 0 < \alpha < 1, \quad s = \sigma + i\omega \quad (\text{П.1.2})$$

Выясним, при каких условиях на функции  $f(t)$  и  $\lambda(\bar{x})$  решение интегрального уравнения (1.23) эквивалентно решению дифференциального уравнения с дробной производной по  $t$ . Пусть существуют значения следующих операторов:

$$D_{0+}^{\alpha} m(\bar{x}, t), \quad \Delta m(\bar{x}, t) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} m(\bar{x}, t), \quad I_{0+}^{1-\alpha} m(\bar{x}, t)|_{t=0}.$$

В этих предположениях выполняется следующее утверждение.

**Лемма П.1.5.** Образ Фурье по  $\bar{x}$  и Лапласа по  $t$  решения интегрального уравнения (1.23) совпадает с образом Фурье по  $\bar{x}$  и Лапласа по  $t$  решения начальной задачи

$$I_{0+}^{1-\alpha} m(\bar{x}, t)|_{t=0} = m_{1-\alpha}(\bar{x}) \quad (\text{П.1.3})$$

для дифференциального уравнения:

$$\frac{\partial^{\alpha} m(\bar{x}, t)}{\partial t^{\alpha}} = C \Delta m(\bar{x}, t) + Q(\bar{x}, t), \quad (\text{П.1.4})$$

где образ Фурье по  $\bar{x}$  и Лапласа по  $t$  функции  $Q(\bar{x}, t)$  имеет вид

$$\tilde{Q}(\bar{u}, s) = \tilde{G}(\bar{u}, s) \tilde{F}(s) C_1(\bar{u}, s) - \hat{m}_{1-\alpha}(\bar{u}), \quad (\text{П.1.5})$$

а  $C_1(\bar{u}, s)$  представляется в виде

$$C_1(\bar{u}, s) = \frac{s^{\alpha} + C \sum_{i=1}^n u_i^2}{1 - \tilde{f}(s) \hat{\lambda}(\bar{u})}, \quad \alpha \in (0, 1) \text{ и } C \in \mathbb{R}^1 \quad (\text{П.1.6})$$

Доказательство. Покажем, когда имеет место совпадение образов решений (1.23) и (П.1.3-П.1.4). Результат преобразования Лапласа по  $t$  и Фурье по  $\bar{x}$  интегрального уравнения (1.23) дает

$$\tilde{m}(\bar{u}, s) = \hat{\lambda}(\bar{u}) \tilde{f}(s) \tilde{m}(\bar{u}, s) + \tilde{G}(\bar{u}, s) \tilde{F}(s),$$

Откуда

$$\tilde{m}(\bar{u}, s) = \frac{\tilde{G}(\bar{u}, s)}{1 - \tilde{f}(s)\hat{\lambda}(\bar{u})} \tilde{F}(s). \quad (\text{П.1.7})$$

С другой стороны, результат преобразования Лапласа по  $t$  и Фурье по  $\bar{x}$  уравнения с дробной производной (П.1.4) есть

$$\tilde{m}(\bar{u}, s)s^\alpha - I_{0+}^{1-\alpha} \hat{m}(\bar{u}, 0) = -C \tilde{m}(\bar{u}, s) \sum_{i=1}^n u_i^2 + \tilde{Q}(\bar{u}, s),$$

откуда находим

$$\tilde{m}(\bar{u}, s) = \frac{\tilde{Q}(\bar{u}, s) + \hat{m}_{1-\alpha}(\bar{u})}{s^\alpha + C \sum_{i=1}^n u_i^2}. \quad (\text{П.1.8})$$

Сравнивая выражения (П.1.7) и (П.1.8), получаем

$$\frac{\tilde{G}(\bar{u}, s)}{1 - \tilde{f}(s)\hat{\lambda}(\bar{u})} \tilde{F}(s) = \frac{\tilde{Q}(\bar{u}, s) + \hat{m}_{1-\alpha}(\bar{u})}{s^\alpha + C \sum_{i=1}^n u_i^2}. \quad (\text{П.1.9})$$

При условиях (П.1.5-П.1.6) равенство (П.1.9) обращается в тождество.

Лемма П.1.5 доказана.

**Замечание П.1.6.** Для непрерывных в точке  $\bar{x}=0$  функций  $m(\bar{x}, t)$  выполняется условие:  $I_{0+}^{1-\alpha} m(\bar{x}, t)|_{t=0} = 0$ .

На основании леммы П.1.5 с учетом взаимной однозначности преобразований Лапласа и Фурье на подклассе непрерывных функций из класса медленно растущих обобщенных функций получаем следующий результат.

**Теорема П.1.7.** На подклассе непрерывных функций из класса медленно растущих обобщенных функций интегральное уравнение (1.23) эквивалентно начальной задаче (П.1.3-П.1.4).

**Следствие П.1.8.** Пусть при малых  $\bar{u}$ ,  $s$  выполняется условие

$$\tilde{f}(s)\hat{\lambda}(\bar{u}) \sim 1 - \frac{s^\alpha + C \sum_{i=1}^n u_i^2}{C_1(\bar{u}, s)} \quad (\text{П.1.10})$$

для функции  $C_1(\bar{u}, s)$  такой, что существует  $L^{-1}\left(\tilde{G}(\bar{u}, s)\tilde{F}(s)C_1(\bar{u}, s)\right)$ . Тогда задача (П.1.3-П.1.4) асимптотически при больших  $t$  эквивалентна интегральному уравнению CTRW-модели (1.23).

**Замечание П.1.9.** В работе [73] приведено достаточное условие асимптотической сводимости интегрального уравнения (1.23) к начальной задаче для дифференциального уравнения с дробной производной по времени:

$$\begin{aligned}\tilde{f}(s) &= 1 - s^\alpha + o(s^\alpha), \\ \hat{\lambda}(\bar{u}) &= 1 - C \sum_{i=1}^n u_i^2 + o\left(\sum_{i=1}^n u_i^2\right),\end{aligned}\tag{П.1.11}$$

которые являются частным случаем условия (П.1.10) при  $C_1(\bar{u}, s) = 1$ . В этом случае

$$\begin{aligned}\tilde{Q}(\bar{u}, s) &= \tilde{G}(\bar{u}, s)\tilde{F}(s) - \hat{m}_{1-\alpha}(\bar{u}), \\ \tilde{f}(s)\hat{\lambda}(\bar{u}) &\sim 1 - s^\alpha - C \sum_{i=1}^n u_i^2.\end{aligned}$$

и задача (П.1.3-П.1.4) принимает вид

$$\begin{cases} I_{0+}^{1-\alpha} m(\bar{x}, 0) = \hat{m}_{1-\alpha}(\bar{x}), \\ \frac{\partial^\alpha m(\bar{x}, t)}{\partial t^\alpha} = C \Delta m(\bar{x}, t) + I_{0+}^{1-\alpha} g(\bar{x}, t) - I_{0+}^{1-\alpha} m(\bar{x}, t)|_{t=0}. \end{cases}\tag{П.1.12}$$

**Замечание П.1.10.** Так как функция  $G(\bar{x}, t)$  включает в себя начальное значение функции  $m(\bar{x}, t)$ , то дифференциальное уравнение содержит в правой части начальные данные, в отличие от дифференциальных уравнений с целочисленной производной по  $t$ . Следовательно, *любое уравнение с дробной производной по  $t$ , описывающее CTRW модель субдиффузии, обязательно содержит ненулевую правую часть.* Механический смысл этого факта состоит в следующем. Плотность вероятности задержки  $f(t) \neq 0$  в точке  $x \in R^n$  позволяет задержаться некоторым частицам в этой точке до времени  $t$ , и на этот момент времени наличие всех таких частиц равносильно их появлению из источника.

**Следствие. П.1.11.** Решение начальной задачи

$$I_{0+}^{1-\alpha} m(\bar{x}, 0) = m_{1-\alpha}(\bar{x})$$

для дифференциального уравнения

$$\frac{\partial^\alpha m(\bar{x}, t)}{\partial t^\alpha} = C \Delta m(\bar{x}, t)$$

не может являться реализацией процесса субдиффузии в CTRW модели.

Таким образом, дифференциальное уравнение вида (П.1.4) определяет CTRW-модель субдиффузии тогда и только тогда, когда правая часть этого уравнения удовлетворяет условиям (П.1.5) и (П.1.6).

### П.1.3. CTRW-модель и классическая диффузия

В этом параграфе мы приведем примеры CTRW-моделей, [73], [78], которые приводят к дифференциальному уравнению классической диффузии.

Рассмотрим вначале классическое блуждание: пусть частица перемещается по узлам равномерной прямоугольной сетки в  $R^n$  с шагом  $h$ , время каждого шага  $\tau$ . Положения частиц определяются в моменты времени, кратные  $\tau$ .

Определим CTRW-модель такого процесса. Функции распределения перемещения и задержки имеют вид

$$\begin{aligned} f(t) &= \delta(t - \tau) \\ \lambda(\bar{x}) &= \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n (\delta(\bar{x} - \bar{e}_i h) + \delta(\bar{x} + \bar{e}_i h)) \end{aligned} \quad (\text{П.1.13})$$

где векторы  $\bar{e}_i$  – координатные орты. Непосредственной подстановкой этих значений  $f(t)$  и  $\lambda(\bar{x})$  уравнение (1.23) сводится к задаче

$$\begin{cases} m(\bar{x}, t) = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n (m(\bar{x} - \bar{e}_i h, t - \tau) + m(\bar{x} + \bar{e}_i h, t - \tau)), & t \geq \tau, \\ m(\bar{x}, 0) = m_0(\bar{x}). \end{cases}$$

Раскладывая первое уравнение системы в ряд Тейлора по  $t$  и  $\bar{x}$ , преобразуем эту задачу к виду

$$\begin{cases} \tau \frac{\partial m(\bar{x}, t)}{\partial t} = \frac{h^2}{2n} \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 m(\bar{x}, t)}{\partial x_i^2} + O(\tau^2 + \tau h^2 + h^4), \\ m(\bar{x}, 0) = m_0(\bar{x}), \end{cases}$$

откуда предельным переходом при  $\tau \rightarrow 0$ ,  $h \rightarrow 0$ , при выполнении условия

$$\lim_{\substack{\tau \rightarrow 0 \\ h \rightarrow 0}} \frac{h^2}{\tau} = D_0 \text{ получаем для всех } t:$$

$$\begin{cases} \frac{\partial m(\bar{x}, t)}{\partial t} = D_0 \Delta m(\bar{x}, t), \\ m(\bar{x}, 0) = m_0(\bar{x}). \end{cases} \quad (\text{П.1.14})$$

В работе [73] приводятся более общие условия, которым должны удовлетворять функции  $f(t)$  и  $\lambda(x)$ , для того, чтобы CTRW-модель асимптотически при  $t \gg 0$  сводилась к задаче (П.1.14):

$$\begin{aligned} \tilde{f}(s) &= 1 - s\tau + O(\tau^2), \\ \hat{\lambda}(u) &= 1 - \sigma^2 h^2 + O(h^4). \end{aligned} \quad (\text{П.1.15})$$

Подстановка таких трансформант в образ Фурье по  $\bar{x}$  и Лапласа по  $t$  интегрального уравнения (1.23) асимптотически при  $t \gg 0$  приводит (1.23) к задаче (П.1.14) при  $D_0 = \frac{\sigma^2}{\tau}$ .

В работе [78] приводятся в качестве примера таких плотностей вероятности функции

$$f(t) = \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau}, \quad \lambda(x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\sigma^2}} e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}}.$$

Заметим, что общий случай (П.1.15) содержит и первую модель (П.1.13) классического блуждания, что проверяется вычислением образов Фурье и Лапласа функций  $f(t)$  и  $\lambda(\bar{x})$ , (П.1.13).

#### П.1.4. Аппроксимация решения дифференциального уравнения с дробной производной по времени решением интегроразностного уравнения CTRW модели

Для дифференциальных уравнений с дробной производной по  $t$ , имеющих физический смысл в рамках CTRW модели, о котором говорилось в предыдущем параграфе, рассмотрим методы приближения решений, основанные на том, что такие задачи являются предельными для некоторых процессов, описываемых CTRW-моделями.

Вернемся к модели субдиффузии (В), описываемой уравнением (1.24). Покажем, что в рамках CTRW модели решение этого уравнения аппроксимирует при  $h \rightarrow 0$  решение задачи (П.1.3-П.1.4). В этом смысле задача (П.1.3-П.1.4) реализует дифференциальную модель, описывающую предельный процесс субдиффузии (1.24) при  $h \rightarrow 0$ . Имеет место следующая теорема.

**Теорема П.1.12.** Решение уравнения (1.24) для функции  $f(t)$ , удовлетворяющей (1.16), аппроксимирует при больших  $t$  решение задачи (П.1.3-П.1.4) с порядком  $h^2$  на подклассе непрерывных функций из класса медленно растущих обобщенных функций с правой частью вида

$$Q(\bar{x}, t) = I_{0+}^{1-\alpha} g(\bar{x}, t) - I_{0+}^{1-\alpha} m(\bar{x}, 0), \quad (\text{П.1.15})$$

и с коэффициентом  $C$  в уравнении (П.1.4) вида

$$C = \frac{D_\alpha \Gamma(\alpha + 1)}{2n}. \quad (\text{П.1.16})$$

Доказательство.

Сначала покажем аппроксимацию образов Лапласа по  $t$  и Фурье по  $\bar{x}$  решений указанных уравнений.

При заданных образах Лапласа функции  $f(t)$ , (1.16) и Фурье функции  $\lambda(\bar{x})$ , (1.17), определяем результат преобразования Лапласа по  $t$  и Фурье по  $\bar{x}$  уравнения (1.24):

$$\tilde{m}(\bar{u}, s) = \frac{\frac{1}{n} \tilde{m}(\bar{u}, s) \sum_{i=1}^n \cos(u_i h)}{1 + \frac{h^2}{D_\alpha \Gamma(\alpha+1)} s^\alpha} + \frac{\tilde{G}(\bar{u}, s)}{1 + \frac{h^2}{D_\alpha \Gamma(\alpha+1)} s^\alpha} \frac{h^2}{D_\alpha \Gamma(\alpha+1)} s^{\alpha-1},$$

откуда получаем

$$\tilde{m}(\bar{u}, s) = \frac{\tilde{G}(\bar{u}, s)/s}{1 + \frac{D_\alpha \Gamma(\alpha+1)}{h^2 s^\alpha} (1 - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \cos(u_i h))} \quad (\text{П.1.17})$$

С другой стороны, при условии (П.1.15) результат преобразования Лапласа по  $t$  и Фурье по  $\bar{x}$  уравнения (П.1.4) имеет вид

$$\tilde{m}(\bar{u}, s) s^\alpha = -\frac{D_\alpha \Gamma(\alpha+1)}{2n} \tilde{m}(\bar{u}, s) \sum_{i=1}^n u_i^2 + Q(\bar{u}, s) - I_{0+}^{1-\alpha} \tilde{m}(\bar{u}, 0),$$

откуда

$$\tilde{m}(\bar{u}, s) = \frac{\tilde{G}(\bar{u}, s)/s}{1 + \frac{D_\alpha \Gamma(\alpha+1)}{2ns^\alpha} \sum_{i=1}^n u_i^2} \quad (\text{П.1.18})$$

Вычислим разность полученных образов  $\tilde{\theta}(\bar{u}, s)$ . Вычитая правые части равенств (П.1.18) и (П.1.17), получаем:

$$\begin{aligned} \tilde{\theta}(\bar{u}, s) &= \frac{\tilde{G}(\bar{u}, s)/s}{1 + \frac{D_\alpha \Gamma(\alpha+1)}{h^2 s^\alpha} (1 - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \cos(u_i h))} - \frac{\tilde{G}(\bar{u}, s)/s}{1 + \frac{D_\alpha \Gamma(\alpha+1)}{2ns^\alpha} \sum_{i=1}^n u_i^2} = \\ &= \frac{\tilde{G}(\bar{u}, s)}{s} \left( \frac{1}{1 + \frac{D_\alpha \Gamma(\alpha+1)}{nh^2 s^\alpha} (\sum_{i=1}^n \frac{u_i^2 h^2}{2} + O(\sum_{i=1}^n \frac{u_i^4 h^4}{4!}))} - \frac{1}{1 + \frac{D_\alpha \Gamma(\alpha+1)}{2ns^\alpha} \sum_{i=1}^n u_i^2} \right). \end{aligned}$$

При  $\bar{u}, s \ll 1$  (при  $u^2/s^\alpha \ll 1$ )

$$\tilde{\theta}(\bar{u}, s) \sim \tilde{G}(\bar{u}, s) \frac{D_\alpha \Gamma(\alpha+1)}{ns^{\alpha+1}} \cdot O(\sum_{i=1}^n \frac{u_i^4 h^2}{4!}).$$

Прообраз Лапласа по  $t$  и Фурье по  $\bar{u}$  от полученной функции есть

$$\theta(\bar{x}, t) \sim \frac{D_\alpha \Gamma(\alpha+1)}{4!n} I_{0+t}^{\alpha+1} \left( \sum_{i=1}^n \frac{\partial^4 G(\bar{x}, t)}{\partial x_i^4} \right) h^2$$

следовательно, при больших значениях  $t$  решение уравнения (1.24) аппроксимирует решение задачи (П.1.3-П.1.4) с порядком  $h^2$ . Теорема П.1.12 доказана.

Итак, решение начальной задачи для дифференциального уравнения с дробной производной по времени аппроксимируется решением интегроразностного уравнения (1.24), для решения которого в главе II были разработаны численные методы. Тогда из теорем П.1.12, 2.6, 2.12 и 2.17 получаем следующую теорему.

**Теорема П.1.13.** Решение численных схем (2.11), (2.16), (2.26) сходится к решению начальных задач (П.1.3-П.1.4) в  $R^1-R^3$ , соответственно, с порядком  $O(h^2 + \Delta t)$ .

Для субдиффузионного процесса в ограниченной области  $\Omega = \{\bar{x}_a \leq \bar{x} \leq \bar{x}_b\}$  с условием непротекания на границах в задачу (П.1.3-П.1.4) необходимо добавить краевое условие

$$\frac{\partial m(\bar{x}_{\text{границные}}, t)}{\partial \bar{n}} = 0. \quad (\text{П.1.19})$$

В следующей лемме будет показано, что это условие получается как предельное для краевых условий (2.1), (2.17) в  $R^1-R^3$ . Его вывод в  $R^1-R^3$  проводится аналогично, поэтому ограничимся доказательством в  $R^1$ .

**Лемма П.1.14.** Краевое условие задачи (2.1) при  $h \rightarrow 0$  аппроксимирует условие (П.1.19) с порядком  $h^2$ .

Доказательство.

Трансформанта Лапласа краевых условий задачи (2.1) имеет вид:

$$\begin{cases} \tilde{m}(x_a, s) = \frac{1}{2} (\tilde{m}(x_a, s) + \tilde{m}(x_a + h, s)) \tilde{f}(s) + m_0(x_a) \tilde{F}(s) + \tilde{G}(x_a, s); \\ \tilde{m}(x_b, s) = \frac{1}{2} (\tilde{m}(x_b, s) + \tilde{m}(x_b - h, s)) \tilde{f}(s) + m_0(x_b) \tilde{F}(s) + \tilde{G}(x_b, s); \end{cases}$$



Раскладывая в ряд Тейлора по  $x$ , получаем

$$\begin{cases} 0 = \left( \frac{h}{2} \frac{\partial \tilde{m}(x_a, s)}{\partial x} + O(h^2) \right) \tilde{f}(s) + m_0(x_a) \tilde{F}(s) + \tilde{G}(x_a, s); \\ 0 = \left( \frac{h}{2} \frac{\partial \tilde{m}(x_b, s)}{\partial x} + O(h^2) \right) \tilde{f}(s) + m_0(x_b) \tilde{F}(s) + \tilde{G}(x_b, s); \end{cases}$$

И, вычисляя обратное преобразование Лапласа с учетом того, что  $f(t)$  определяется по формуле (1.19), получаем

$$\begin{cases} 0 = \frac{h}{2} \frac{\partial m(x_a, t)}{\partial x} + O(h^3); \\ 0 = \frac{h}{2} \frac{\partial \tilde{m}(x_b, s)}{\partial x} + O(h^3). \end{cases}$$

Следовательно, краевое условие задачи (2.1) аппроксимирует условие (П.1.19) с порядком  $h^2$ . Лемма П.1.14 доказана.

### **П.1.5. Метод типа Монте-Карло решения начальной задачи для дифференциального уравнения субдиффузии с дробной производной по времени**

В п.П.1.1-П.1.3 показано, что начальная задача (П.1.4) для дифференциального уравнения (П.1.3) определяет CTRW-модель субдиффузии тогда и только тогда, когда правая часть этого уравнения удовлетворяет условиям (П.1.5) и (П.1.6) для некоторых функций плотности вероятности  $f(t)$  и  $\lambda(\bar{x})$ .

При рассмотрении субдиффузионного процесса автору представляется более естественным решать уравнение (1.23), чем предельную для процесса дифференциальную задачу. Теоремы П.1.7, П.1.12 и следствие П.1.8 предоставляют возможность использовать решение уравнения (1.23) в качестве приближения решения задачи (П.1.3-П.1.4).

В п.1.5-1.6 построен метод прямого стохастического моделирования решения уравнения (1.23). Следовательно, решение дифференциальной

задачи (П.1.3-П.1.4) можно представить реализацией этой стохастической имитационной модели. Тогда на основе теоремы П.1.12 и теоремы 1.35 получаем следующую теорему.

**Теорема П.1.15.** Функция плотности  $m_{K(T)}(\bar{x}, T)$ , полученная в результате стохастической реализации блуждания  $K$  частиц, сходится по вероятности к решению  $m(\bar{x}, t)$  задачи (П.1.3-П.1.4) при  $K \rightarrow \infty$ .

**Замечание П.1.16.** Сравнительный анализ метода прямого стохастического моделирования и метода дискретизации интегроразностного уравнения (1.23) приведен в п.2.5. Так как дифференциальная задача (П.1.3-П.1.4) является предельной моделью для интегроразностного уравнения (1.23), описывающего процесс субдиффузии при  $h \rightarrow 0$ , то выводы, сделанные относительно сравнения двух методов численного решения уравнения (1.23), остаются в силе и для задачи (П.1.3-П.1.4).