

# МЕТОД СЛУЧАЙНЫХ БЛУЖДАНИЙ В МОДЕЛИРОВАНИИ СУБДИФФУЗИИ

В. А. Селезнев, Л. В. Пехтерева, Е. В. Исаева

*Новосибирский государственный технический университет, 630073, Новосибирск*

УДК 62-83: 531.3

Для CTRW-модели процесса субдиффузии выведено уравнение динамики концентрации для двух шаблонов окрестности локального перемещения частиц — с 4(6) и 12 узлами. Разработаны численные методы решения этого уравнения и реализация стохастического метода случайных блужданий частиц. Доказана сходимость функции концентрации, полученной стохастическим методом, к решению уравнения динамики концентрации, и определено, что стохастический метод эффективнее численного решения уравнения динамики концентрации. Показано, что изменение геометрии шаблона, соответствующее физической реализации процесса, не сильно сказывается в реализации стохастического метода, в то время как уравнение субдиффузии и алгоритм его решения требуется строить заново. Предложенные методы моделирования субдиффузии применяются для решения одного класса уравнений с дробной производной по времени.

**Ключевые слова:** субдиффузия, CTRW-модель, метод Монте-Карло, численные методы, имитационные модели аномальной кинетики, дробная производная.

## Введение

Процессы переноса на множествах евклидова пространства дробной размерности  $d > 1$  с самоподобной структурой обладают тем свойством, что средний квадрат перемещения нелинейно зависит от времени  $t$  при  $t \gg 0$ :

$$\langle x^2 \rangle \sim Dt^a, \quad a = 1/d, \quad \text{при } a < 1 \quad (1)$$

Процессы, характеризующиеся свойством (1), относятся к классу субдиффузионных процессов. Для них уравнение диффузии представляется различными способами, в зависимости от физической реализации, для которой строится имитационная модель (уравнение классической диффузии, основанное на законе Фика, имеет стандартную форму). Подробное изложение моделей неклассической диффузии можно найти, например, в [5–8].

Авторами данной работы построены и численно реализованы модели субдиффузии, основанные на CTRW-модели, [1–4]. Блуждание диффундирующих частиц в поровом пространстве дробной сеточной размерности моделируется блужданием с задержками по узлам решетки с шагом  $h$  в евклидовом пространстве. Нами рассмотрены 2 шаблона окрестности локального перемещения частиц в CTRW-модели — с 4(6) и 12 узлами. Для этих шаблонов построены уравнения субдиффузии и разработаны численные схемы их решения. Также реализован метод прямого стохастического моделирования, имитирующий субдиффузионный процесс.

Нами доказана сходимость функции концентрации, полученной стохастическим методом, к решению уравнения динамики концентрации (функции плотности вероятности оказаться в момент  $t$  в точке  $x$ ). Анализ построенных методов показывает, что метод Монте-Карло более эффективен, нежели метод численного решения уравнения: при заданной требуемой точности решения время вычислений на порядки ниже. Более того, его несомненное преимущество заключается в том, что при моделировании различных физических процессов изменение шаблона локальных перемещений приводит к изменению уравнения субдиффузии, и требуется заново строить алгоритм его решения, а в реализации стохастического метода это изменение сказывается не столь сильно.

# 1 Уравнение субдиффузии в CTRW-модели и его численное решение

Выведем уравнение, определяющее функцию концентрации  $m(x, t)$  блуждающих частиц в точке пространства  $x$  в момент времени  $t$ . Так как субдиффузия — это замедленный по сравнению с классической диффузией процесс, и частицы не совершают больших скачков, то будем считать, что частицы имеют локализованный носитель. Тогда блуждание диффундирующих частиц в поровом пространстве дробной размерности можно моделировать блужданием с задержками по узлам евклидовой решетки с шагом  $h$ , причем заданы начальное распределение частиц  $m(x, 0) = m_0(x)$ ; функция источника  $g(x, t)$ ; функция  $f(t)$  плотности вероятности задержки частицы на время  $t$ .

Рассмотрим два шаблона окрестности локального перемещения частиц на плоскости — с 4 и 12 узлами. Сначала предположим, что на каждом шаге частица может перемещаться равновероятно в один из соседних узлов решетки (на плоскости 4 соседних узла, в пространстве — 6). Тогда время задержки  $t$  представляется случайной величиной с функцией плотности вероятности  $f(t)$  вида:

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

где  $\alpha = 1/d$  — показатель аномальности,  $D_\alpha$  — коэффициент диффузии. Представление (2) получено авторами, [1], исходя из требования того, что при больших значениях  $t$  функция концентрации удовлетворяет общему уравнению CTRW-модели, [5], со свойством (1). В этом случае уравнение субдиффузии принимает вид, [1]:

$$m(x, t) = \frac{1}{2n} \int_0^t \sum_{i=1}^n (m(x - e_i h, t - t') + m(x + e_i h, t - t')) f(t') dt' + \int_0^t g(x, t - t') F(t') dt' + m_0(x) F(t), \quad (3)$$

где  $n$  — размерность пространства ( $n = 1, 2, 3$ ),  $e_i$  — координатные орты,  $F(t)$  — вероятность задержки частицы на время, не меньшее  $t$ .

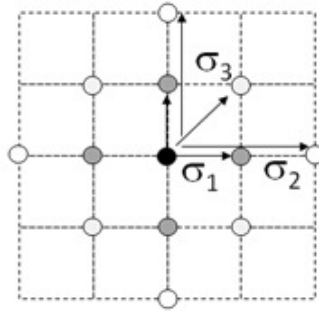


Рис. 1: Шаблон, задающий локальные перемещения частиц в  $R^2$ .

Для того чтобы задать локальное распределение концентрации более точно, рассмотрим 12-узловой шаблон на плоскости, изображенный на рис. 1. Вероятности перемещения в соседние, диагональные и дальние узлы зададим вероятностями  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$  и  $\sigma_3$ , причем  $\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 = 1$ . В этом случае, потребовав выполнения свойства (1), в работе [3] мы получили представление времени задержки  $t$  случайной величиной с функцией плотности вероятности  $f(t)$  вида:

$$f(t) = \frac{\alpha A}{(A^{1/\alpha} + t)^{\alpha+1}}, \quad A = \frac{h^2(2 - \sigma_1 + 2\sigma_2) \sin(\alpha\pi)}{D_\alpha \alpha \pi}, \quad 0 < \alpha < 1, \quad (4)$$

И уравнение субдиффузии имеет вид, [3]:

$$m(x, t) = \int_0^t \left( \sigma_1 \sum_{i=1}^2 (m(x - e_i h, t - t') + m(x + e_i h, t - t')) + \sigma_2 \sum_{i=1}^2 (m(x - 2e_i h, t - t') + m(x + 2e_i h, t - t')) + \sigma_3 (m(x - (e_1 + e_2)h, t - t') + m(x + (e_1 + e_2)h, t - t') + m(x + (e_1 + e_2)h, t - t') + m(x + (e_1 + e_2)h, t - t')) \right) f(t') dt' + \int_0^t g(x, t - t') F(t') dt' + m_0(x) F(t), \quad (5)$$

где  $n$  — размерность пространства ( $n = 1, 2, 3$ ),  $e_i$  — координатные орты.

Для моделирования субдиффузии нами построены численные схемы для решения уравнений (3) и (5), [1,5]. Для найденной сеточной функции  $m_h(x, t) : |m_h(x, t) - m(x, t)| \sim C\tau^2$ , где  $\tau$  — шаг сетки по времени,  $C$  — константа, а порядок сложности вычислительного алгоритма составляет  $O\left(\frac{T^2 L}{2\tau^2}\right)$ , где  $L$  — количество узлов решетки,  $T$  — заданное время.

Время вычислений при усложнении шаблона растет. В таблице 1 приведено время вычисления сеточной функции  $m_h(x, t)$  на 4-шаблоне и 12-шаблоне (на компьютере с частотой процессора 1,66ГГц) на решетке с шагом  $h = 0,01$  для  $T = 100$ , при  $\tau = 0,01$ .

Время $T$	50	100	500	1000
4 узла, $a = 0,5$	1:53	6:45	162:11	647:22
12 узлов, $a = 0,5$				
4 узла, $a = 0,8$	0:15	0:33	16:51	55:46
12 узлов, $a = 0,8$				

Таблица 1: Время вычисления решения уравнения субдиффузии для разных значений  $T$  (мин:сек).

Рост времени вычисления в зависимости от  $T$ , указанный в таблице 1, экспериментально подтверждает оценки сложности алгоритмов, приведенные выше.

Шаблон 12 узлов подходит для широкого круга задач (вариации параметров  $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$  более точно задают локальное распределение концентрации, учитывается возможность перемещения в любую сторону), но его обобщение на трехмерный случай приводит к труднореализуемым численным схемам, сложность вычислительного алгоритма возрастает до  $O\left(\frac{T^3 L}{2\tau^3}\right)$ . Далее, при необходимости изменения шаблона мы сталкиваемся с тем, что численные схемы значительно меняются, и каждый новый шаблон требует создания нового вычислительного алгоритма и аналитического подтверждения порядка сходимости и аппроксимации. Указанные сложности привели нас к поиску более эффективного способа моделирования субдиффузии.

## 2 Метод прямого стохастического моделирования

Прямая стохастическая имитационная модель субдиффузии строится как реализация блуждания частиц на равномерной решетке в  $R^n$  с заданной функцией плотности вероятности задержки частиц (2) или (3) для рассмотренных нами шаблонов. В соответствии с условиями CTRW-модели, в каждый момент времени частицы находятся в узлах равномерной решетки с шагом  $h$  в  $R^n$  ( $n = 1, 2, 3$ ). Распределение частиц по узлам  $x$  задается сеточной функцией концентрации  $m_h(x, t)$  — количество частиц, заключенных в элементе объема множества в заданном узле  $x$  в момент времени  $t$ , отнесенное к общему количеству частиц.

1. В соответствии с начальной концентрацией  $m(x, 0)$  распределяем  $K$  частиц по узлам решетки (оценка числа  $K$  в зависимости от требуемой точности моделирования будет приведена далее). Количество частиц в узле  $x$  в начальный момент времени  $t = 0$  обозначим  $k(x, 0) = Sm_0(x)$ , где

$$S = \frac{K}{\sum_{\text{по всем узлам } s} m_0(s)} \text{ — количество частиц, представляющее единицу массы.}$$

2. Каждая частица задерживается в узле на некоторое случайное время  $\tau$ , определенное плотностью вероятности  $f(t)$ , после чего совершает мгновенное перемещение в один из соседних узлов решетки,

разрешенных шаблоном (на шаблоне 4 узла — равновероятно в один из соседних узлов, на шаблоне 12 узлов — с заданными вероятностями  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$  и  $\sigma_3$ ). Способ моделирования задержки  $\tau$  частиц в узлах подробно описан в [1, 3].

3. В соответствии с функцией источника  $g(x, t)$  в процесс блуждания постоянно включаются новые частицы. В момент времени  $t$  общее количество частиц определяется по формуле:

$$K(t) = K + S \int_{R^n} dx \int_0^t g(x, t') dt'$$

4. По истечении времени  $T$  подсчитывается итоговое количество частиц в каждом узле и приближенно восстанавливается функция:

$$m_h(x, t) = \frac{k(x, T)}{S}$$

Нами доказано, что функция  $m_h(x, t)$ , полученная в результате стохастической реализации блуждания частиц, сходится по вероятности к решению  $m(x, t)$  уравнения субдиффузии. Получена вероятностная оценка требуемого для стохастического моделирования количества частиц в зависимости от требуемой точности отклонения стохастической реализации от решения уравнения субдиффузии:

$$P(\max_x |m(x, t) - m_h(x, t)| < \varepsilon) = P_0, \quad \text{при } S \geq \left( \frac{1}{2\varepsilon} \Phi^{-1} \left( \frac{1 - P_0}{2} \right) \right)^2 \quad (6)$$

где  $\Phi$  — функция Лапласа.

В следующей части мы приведем анализ результатов численного моделирования.

### 3 Сравнение метода прямого стохастического моделирования и численного решения уравнения субдиффузии

Сравним результаты моделирования с теоретическими оценками. Обозначим  $m_h(x, t)$  — функция концентрации, полученная методом численного решения уравнения, а  $m_{st}(x, t)$  — полученная стохастическим методом. Мы вычислили и сравнили эти функции, задав одинаковую точность для обоих методов. Наши теоретические оценки погрешностей подтвердились, т.е. отклонение решения, полученного стохастическим методом, от численного решения уравнения не превышает погрешности, с которой численное решение приближает решение уравнения, и, следовательно, стохастическое решение должно иметь ту же погрешность, что и численное решение уравнения, при соблюдении условия (6).

Численные результаты показали, что, несмотря на нерегулярность функции разности  $|m_h(x, T) - m_{st}(x, T)|$ , построенной на плоскости для шаблонов 4 и 12 узлов, точность моделирования укладывается в теоретически определяемые рамки. Например, для шаблона 12 узлов при  $T = 100$ ,  $a = 0,5$ ,  $\tau = 0,05$ ,  $\sigma_1 = 0,5$ ,  $\sigma_2 = 0,3$ ,  $\sigma_3 = 0,2$ , отклонение функций составляет  $\varepsilon \sim \tau^2 = 0,0025$ . Оценки отклонений в  $R^3$  для функции разности  $|m_h(x, T) - m_{st}(x, T)|$ , проведенные для всей функции и выборочно на некоторых сечениях вертикальными плоскостями (локальный шаблон из 6 узлов, уравнение (3)), показали, что максимальное абсолютное отклонение также имеет порядок  $\varepsilon \sim \tau^2$ , среднеквадратическое отклонение несколько меньше. Поведение точности моделирования в  $R^2$  с ростом времени  $T$  при  $\tau = 0,05$  показано в таблице 2:  $\varepsilon \sim \tau^2 = 0,0025$  (локальный шаблон из 4 узлов, уравнение (3)).

$T$	10	50	100	500
<b>среднеквадратичное значение отклонения по всей области</b>	0,00152	0,00167	0,00173	0,00164
<b>максимальное абсолютное отклонение</b>	0,00188	0,00205	0,00276	0,0030

Таблица 2: Экспериментально полученные значения точности моделирования при заданной точности  $\varepsilon = \tau^2 = 0,0025$ ,  $a = 0,5$ .

Далее, сравним время, затраченное на моделирование субдиффузии методом численного интегрирования и прямого стохастического моделирования. Исходя из (6) и оценки сложности численного интегрирования, получаем:

$$r = \frac{t_{\text{сет}}}{t_{\text{стох}}} = \frac{2h^2 L(T^2 + T\varepsilon)}{M(T)T^\alpha} \left( \Phi^{-1}\left(\frac{1-P_0}{2}\right) \right)^2 \quad (7)$$

Зададим параметры:  $\varepsilon = 0,01$ ,  $h = 0,01$ ,  $P_0 = 0,999$ ,  $L = 10^4$ . В табл. 3. приведено теоретически определенное в соответствии с (7) отношение времени моделирования обоими методами, а в табл. 4 — экспериментально полученное отношение. Из полученных результатов видно, что метод блуждания частиц является более эффективным.

$T$	10	50	100	500	1000
$\alpha = 0,3$	0,174	2,15	7,2	311,892	1264,144
$\alpha = 0,5$	0,1264	1,41	4	44,721	126,491
$\alpha = 0,8$	0,063	0,433	1,004	6,931	15,924

Таблица 3: Отношение времени моделирования  $\frac{t_{\text{сет}}}{t_{\text{стох}}}$ , вычисленное по (7)

$T$	10	50	100	500	1000
$\alpha = 0,3$	0,15	1,88	6,31	256,84	1004,21
$\alpha = 0,5$	0,092	1,00	3,74	35,10	110,10
$\alpha = 0,8$	0,051	1,00	1,01	4,95	13,03

Таблица 4: Отношение времени моделирования  $\frac{t_{\text{сет}}}{t_{\text{стох}}}$ , полученное практически для вычисления по шаблону 4 узла в  $R^2$ .

## 4 Применение численных методов для решения одного класса уравнений с дробной производной

В работе [4] доказано, что решения уравнений субдиффузии в  $R^n$  аппроксимируют с точностью  $O(h^2)$  решения дифференциальных уравнений с дробной производной по  $t$ . Эти уравнения выводятся из (3) и (5) при  $h \rightarrow 0$ . Обозначим  $\frac{\partial^a}{\partial t^a}$  — оператор дробного дифференцирования Римана-Лиувилля. Уравнение (5) аппроксимирует начальную задачу:

$$\begin{cases} \frac{\partial^\alpha m(\bar{x}, t)}{\partial t^\alpha} = \frac{D}{2(2 - \sigma_1 + 2\sigma_2)} \Delta m(\bar{x}, t) + Q(\bar{x}, t); \\ I_{0+}^{1-\alpha} m(\bar{x}, t)|_{t=0} = m_{1-\alpha}(\bar{x}); \end{cases} \quad (8)$$

где  $Q(\bar{x}, t)$  определяется через обратное преобразование Фурье по  $\bar{x}$  и Лапласа по  $t$  от функции:

$$\tilde{Q}(\bar{u}, s) = \tilde{G}(\bar{u}, s) \tilde{F}(s) \tilde{C}_1(\bar{u}, s) - \tilde{m}_1 - \alpha(\bar{u})$$

а функция  $G(\bar{x}, t) = m_0(\bar{x})\delta(t) + g(\bar{x}, t)$  и  $\tilde{C}_1(\bar{u}, s) = \frac{s^\alpha + C \sum_{i=1}^n u_i^2}{1 - \tilde{f}(s)\tilde{\lambda}(\bar{u})}$ .

Уравнение (3) аппроксимирует задачу (8) при  $\sigma_2 = \sigma_3 = 0$  и  $\sigma_1 = 1$ . Следовательно, построенное нами решение уравнений (3), (5) аппроксимирует решение уравнения (8) с точностью  $O(h^2 + \tau^2)$ , а стохастическое решение уравнений (3), (5), аппроксимирует решение (8) с точностью  $O(h^2)$ .

Проведенная нами верификация метода Монте-Карло с численным решением привела к тому, что мы фактически нашли способ решения, не связанный с подробной обработкой шаблона. Информация о геометрии шаблона требуется только на первом этапе вычислений, при определении функции задержек. Далее можно использовать стохастический метод, как более простой.

## Заключение

Для решения начальной задачи для уравнения с дробной производной с правой частью вида (8) мы предложили 2 метода, основанные на приближении этого уравнения интегроразностными уравнениями субдиффузии (3) и (5). Первый метод состоит в численном решении уравнений, второй — прямое стохастическое моделирование (метод Монте–Карло), подразумевающее моделирование при помощи ансамбля частиц и основанное на тех же гипотезах, из которых выводится уравнение субдиффузии.

Получены оценки аппроксимации и сходимости приближенных функций концентрации, полученных нашими методами, к решению уравнения субдиффузии.

Построенные численные решения уравнений (3) и (5) также использованы нами для верификации стохастического метода. Мы доказали, что функция концентрации может быть определена стохастическим методом с той же точностью, что и численное решение уравнения, но с большим преимуществом во времени моделирования. Погрешность вычислений распределяется неравномерно, но укладывается в заданные рамки.

Нами проверено, как стохастический метод работает на разных шаблонах. Изменение геометрии шаблона влечет необходимость переписывать весь алгоритм, а в методе МК это изменение сказывается не столь принципиально (появляются несколько дополнительных ветвей в цикле). Следовательно, мы нашли более простой метод вычисления, не связанный с подробной обработкой шаблона.

## Список литературы

- [1] Пехтерева Л. В. Селезнев В.А. О численной реализации интегрального уравнения CTRW-модели субдиффузии // Доклады АН ВШ РФ. — 2008. — №2(11). — С. 46–58.
- [2] Пехтерева Л. В., Селезнев В. А., Исаева Е. В. Моделирование субдиффузии асимптотически эквивалентными CTRW-процессами. // Научный вестник НГТУ, 2013, № 3(52), С. 119–124.
- [3] Е. В. Исаева, В. А. Селезнев. О численном методе решения интегрального уравнения субдиффузии в двумерном случае // Доклады АН ВШ РФ. — 2012. — №1(18). — С. 28–36.
- [4] Пехтерева Л. В., Селезнев В. А. О методе Монте–Карло для уравнения субдиффузионного процесса с дробной производной по времени. // Сборник научных трудов Sworld, 2015, Т. 21, вып. 1, С. 70–78.
- [5] Metzler R., Klafter J. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach. // Phys. Rep. — 2000. — Vol.339. — p. 1–77.
- [6] Учайкин В. В. Автомодельная аномальная диффузия и устойчивые законы. // Успехи физических наук, — 2003, — Т. 173, — №8, — С. 847–876.
- [7] Р. Т. Сибатов, В. В. Учайкин. Дробно-дифференциальный подход к описанию дисперсионного переноса в полупроводниках. // Успехи физических наук, — 2009, — т. 179, №10, С.1079–1104.
- [8] Заславский Г. М. Гамильтонов хаос и фрактальная динамика. — М.: Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2010.

*Селезнев Вадим Александрович — проф. д.ф.-м.н., зав. каф. ИМ  
Новосибирского государственного технического университета;  
e-mail: selvad@ngs.ru*

*Пехтерева Лина Вадимовна — к.т.н., ст. преподаватель каф. ВМ  
Новосибирского государственного технического университета;  
e-mail: lia8@ngs.ru*

*Исаева Елена Валерьевна — ст. преподаватель каф. ВМ  
Новосибирского государственного технического университета;  
e-mail: elena\_is@ngs.ru*

*Дата поступления — 23 мая 2017 г.*