МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

ОДЕСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ЕКОЛОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Факультет магістерської та

аспірантської підготовки Кафедра

загальної та теоретичної фізики

Магістерська кваліфікаційна робота

на тему: «ФРАКЦІЙНО-КІНЕТИЧНИЙ СЦЕНАРІЙ ДИНАМІКИ СИСТЕМ ІЗ СКЛАДНОЮ МОРФОЛОГІЄЮ»

Виконав студент 2 курсу гркпи МТЗ-64
спеціальності 183 «Технології захисту навколишнього середовища»
Швець Микола Миколайович

Керівник к.ф. – м.н., доцент
Андріанова Ірина Сергіївна

Рецензент доктор техн. наук, професор
Мещеряков Володимир Іванович

Одеса 2018

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ
ОДЕСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ЕКОЛОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Факультет Магістерської та аспірантської підготовки
Кафедра загальної та теоретичної фізики
Рівень вищої освіти магістр
Спеціальність 183 Технології захисту навколишнього середовища

ЗАТВЕРДЖУЮ
Завідувач кафедри загальної та теоретичної фізики Герасимов О.І.

“ 2 ” 11 2017 року

З А В Д А Н Н Я
НА МАГІСТЕРСЬКУ КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ СТУДЕНТА

Швець Микола Миколайович

(прізвище, ім’я, по батькові)

1. Тема роботи: Фракційно-кінетичний сценарій динаміки систем із складною морфологією

керівник роботи *к.ф. – м.н., доцент Андріанова Ірина Сергіївна*
(прізвище, ім’я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)

затверджені наказом вищого навчального закладу від *“2 листопада ”2017 року №321С*

2. Строк подання студентом роботи *01.02 2018р.*
3. Вихідні дані до роботи

4. Зміст розрахунково-пояснювальної записки (перелік питань, які потрібно розробити). 1. Розглянути фракційно-кінетичний сценарій динаміки систем зі складною морфологією; 2. Визначення поняття «дифузія», як складової складної морфології систем; 3. Описати рівняння дифузії для двофазового шаруватого тіла; 4. Розглянути моделі які дозволяють вирішувати питання, які стосуються дифузії в складних систем; 5. Розглянути практичне застосування розглянутих методів дробового числення.

5. Перелік графічного матеріалу (з точним зазначенням обов’язкових креслень)

6. Дата видачі завдання 02.11. 2017

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№ з/п	Назва етапів дипломної роботи	Термін виконання етапів роботи	Оцінка виконання етапу	
			у %	за 4-х бальною шкалою
1	*Огляд новітніх літературних джерел за темою дипломного проекту*	07-20.11.17		
2	*Збір та попередня обробка вихідної інформації, складання бази даних до дослідження*	22-29.11.17		
3	*Узагальнення основних теоретичних положень проекту*	03-20.12.17		
4	*Рубіжна атестація*	25-29.12.17		
5	*Дослідити дифузію у складних, шаруватих системах*	05-20.01.18		
6	*Оформлення магістерської роботи, складання висновків, підготовка комп'ютерної презентації*	25-30.01.18		
7	*Задача на кафедру*	01.02.18		
8	*Підведення підсумків та підготовка рукопису до друку*	04-10.02.18		
9	*Рецензування*	12-13.02.18		
10	*Інтегральна оцінка етапів календарного плану (як середня по етапам)*			
	Інтегральна оцінка виконання етапів календарного плану (як середня по етапам)			

Студент ________ ________________
(підпис) (прізвище та ініціали)

Керівник роботи _____ к.ф. – м.н., доцент Андріанова І. С.
(підпис) (прізвище та ініціали)

АНОТАЦІЯ

«Фракційно-кінетичний сценарій динаміки систем із складною морфологією»

Актуальність теми. В сучасній науці існують системи, які неможливо описати звичайними статистичними методами. Ці методи є неадекватними, у більшості випадків, при дослідженні систем зі складною морфологією. Зокрема, адекватний опис аномальних дифузійних процесів, які виграють велику роль в різних складних системах; процесу дифузії як корисних, так і шкідливих домішок у матеріалах складної (шаруватої) структури неможливий за допомогою другого закону Фіка. Методи і підходи, які використовуються для розв'язання подібних задач, розглянуті у даній роботі.

Запропонований оригінальний метод розгляду процесу дифузії в кусочно-безперервних неоднорідних середовищах, оснований на аналогії з методами, що використовуються у електронній схемотехніці. Метод використаний для розгляду дифузії при послідовному розташуванні шарів, крізь які відбувається квазіодновимірний процес дифузії домішок.

Мета дослідження. Вивчення підходів до математичного опису дифузійних процесів у багатофазних статистично-неоднорідних тілах, процеси дифузії в яких неможливо описати звичайним рівнянням Фіка, яке на практиці використовують для опису дифузійних процесів у однофазних системах.

Об'єкт дослідження. Дифузія в кусочно-безперервних неоднорідних середовищах та аномальна дифузія в системах з дробовою розмірністю.

Предмет дослідження. Вивчення і опис дифузійних процесів в системах зі складною морфологією.

Задачі дослідження:

- вивчення поняття «дифузія», як складової складної морфології систем;
- розглянути моделі які дозволяють вирішувати питання, які стосуються дифузії в складних системах;
- висвітлити основні поняття і положення дифузії в шаруватих системах
- описати рівняння дифузії для двофазового шаруватого тіла;
- розглянути фракційно-кінетичний сценарій динаміки систем зі складною морфологією;
- розглянути практичне застосування розглянутих методів дробового числення;
- на основі оброблених даних запропонувати власний підхід до вирішення деяких з поставлених питань.

Робота містить:

Сторінок – 34

Кількість формул – 29

Літературних посилань – 61

Ключові слова: дифузія, дифузійний потік, .шаруваті системи, коефіцієнт дифузії.

SUMMARY

"Fractional Kinetic Scenario of dynamics for Systems with Complex Morphology"

Actuality of theme. In modern science there are systems that can not be described by ordinary statistical methods. These methods are inadequate, in most cases, in the

study of systems with complex morphology. In particular, an adequate description of abnormal diffusion processes, which are of great importance in various complex systems; the process of diffusion of both useful and harmful impurities in the materials of a complex (layered) structure is impossible with the help of the second law of Fica. The methods and approaches used to solve similar problems are discussed in this paper.

An original method of considering the diffusion process in piecewise continuous inhomogeneous media is proposed, based on analogy with the methods used in electronic circuitry. The method is used to examine diffusion with successive arrangement of layers, through which there is a quasi-one-dimensional diffusion process of impurities.

The aim of the study. The consideration of complex systems whose diffusion processes are impossible to describe by the Fick equation, which in practice is used to describe diffusion processes in single-phase systems. So, in such systems abnormal diffusion is manifested, and there is a need for new methods and approaches to solving such problems.

Object of study. Diffusion in piecewise continuous inhomogeneous media under sequential channel morphology and diffusion for a two-phase layered body.

Subject of study. Study and description of diffusion processes in complex systems with complex morphology.

Objectives of the study:

- definition of "diffusion" as a component of complex morphology of systems;
- to consider models that allow solving issues concerning diffusion in complex systems;
- to highlight the basic concepts and provisions of diffusion in layered systems;

describe the diffusion equation for a two-phase layered body;

- to consider the fractional-kinetic scenario of the dynamics of systems with complex morphology;

- to consider the practical application of the methods of fractional calculation considered;
- on the basis of processed data, to propose own approach to the solution of the questions.

The work includes:

Pages – 34

Formulas – 29

Literary references – 61

Keywords: diffusion, layered systems, diffusion coefficient, time delay, diffusion flow, differentiation.

ЗМІСТ

ВСТУП

Актуальність теми. В сучасній науці існують системи, які неможливо описати звичайними статистичними методами. Ці методи є неадекватними, у більшості випадків, при дослідженні систем зі складною морфологією. Зокрема, друге рівняння Фіка, яке використовують для опису дифузії в однофазних системах, непридатне для опису аномальних дифузійних процесів , які виграють велику роль в різних складних системах. У якості прикладів можна навести дифузію у фракталах, розповсюдження контамінацій у підземних водах і т. ін. [1].

Ще одна задача, яка потребує спеціального розгляду – процес дифузії як корисних, так і шкідливих домішок у матеріалах складної (шаруватої) структури. Шаруваті металеві композити широко використовують в електро-, тепло - і радіотехніці для економії дорогих матеріалів, зменшення ваги та поєднання різнорідних властивостей: підвищення корозійної стійкості, зносостійкості, високої міцності, пластичності тощо. У багатьох випадках дифузія в таких матеріалах призводить до змін їх структури та утворення ділянок додаткового розшарування та міжфазового руйнування, що в свою чергу веде до деградації та зміни властивостей матеріалу. Проте в цій сфері дифузійні процеси несуть і позитивні зміни. Одним із методів зміцнення деталей машин і механізмів є дифузійне насичення стальних виробів вуглецем і азотом [2].

Методи, які використовуються для розв’язання подібних задач, і розглянуті у даній роботі.

Мета дослідження. Розгляд складних систем, процеси дифузії в яких, неможливо описати рівнянням Фіка, яке на практиці використовують для опису дифузійних процесів у однофазних системах, оскільки в таких системах проявляється аномальна дифузія, і виникає потреба в нових методах і підходах до вирішення таких задач.

Об’єкт дослідження. Дифузія в кусочно-неперервних неоднорідних середовищах при послідовній морфології каналів, складні системи з аномальною поведінкою дифузії.

Предмет дослідження. Вивчення і опис дифузійних процесів у системах зі складною морфологією.

Задачі дослідження:

- вивчення поняття «дифузія», як складової складної морфології систем;
- розглянути моделі які дозволяють вирішувати питання, які стосуються дифузії в складних системах;
- висвітлити основні поняття і положення дифузії в шаруватих системах
- описати рівняння дифузії для двофазового шаруватого тіла;
- розглянути фракційно-кінетичний сценарій динаміки систем зі складною морфологією;
- розглянути практичне застосування розглянутих методів дробового числення;
- на основі оброблених даних запропонувати власний підхід до вирішення деяких з поставлених питань.

1 РІВНЯННЯ ДИФУЗІЇ ДЛЯ ДВОФАЗОВОГО ШАРУВАТОГО ТІЛА

У якості приклада побудови корисної моделі дифузії у складному шаруватому тілі розглянемо дифузійну модель двохфазового шаруватого тіла, представлену в роботі [3]. У рівнянні дифузії, отриманому в роботі, неоднорідності структури тіла, в містах контакту фаз якого мають місце стрибки першого роду кінетичного коефіцієнта дифузії, густини тіла та коефіцієнту концентраційної залежності хімічного потенціалу, враховуються в коефіцієнтах, що входять в рівняння дифузії.

В роботі розглядається міграція домішкової речовини у тілі, яке займає область шару товщини z_0 (область Ω_1) і містить випадково розташований прошарок товщини $h = z_2 - z_1$ (область Ω_2). При цьому фізико-хімічні властивості частинок домішки у матриці і прошарку, які розглядаються як тверді фази, можуть істотно відрізнятись. Фізичні характеристики матеріалів кожної фази вважаються відомими.

Кожна фаза розглядається як двокомпонентна термодинамічна система, стан якої задається значеннями температури T, тиску P та масової концентрації домішкової компоненти C.

За сталих тиску P_0 і температури T_0 без урахування конвективного, тобто суми адвекційного і дифузійного перенесення, розподіл концентрації домішкової речовини $c(z,t)$ ($c = C - C_0$, де C_0 — значення концентрації у вихідному стані) описує рівняння:

$$\rho(z)\frac{\partial c(z,t)}{\partial t} = -\vec{\nabla}\cdot\vec{J}(z,t), \qquad (1.1)$$

де $\rho(z)$ — густина тіла, яка приймає значення ρ_1 в області Ω_1 і ρ_2 у прошарку (область Ω_2).

Дифузійний потік маси визначається співвідношенням [2]

$$\vec{J}(z,t) = -L(z)\,\nabla\mu(z,t) \tag{1.2}$$

де $L(z)$ — кінетичний коефіцієнт, $L(z) = \begin{cases} L_1, & z \in \Omega_1 \\ L_2, & z \in \Omega_2 \end{cases}$,

$\mu(z,t)$ — хімічний потенціал мігруючої речовини, залежність якого від концентрації домішкової речовини представлена у вигляді [3, 4]:

$$\mu(T,P,C) = \mu^0(T,P) + A(T)\ln(\gamma C) \tag{1.3}$$

Тут $\mu^0(T,P)$ — певна функція температури T і тиску P; $A(T)$ — функція температури (зазвичай, приймається, що $A(T)=RT/M$, R — універсальна газова стала, M— атомна вага домішкових частинок); γ — активність, яка також може бути функцією параметрів стану T, P і C.

Лінеаризація виразу (1.3) при малих відхиленнях від початкового стану з параметрами T^0, P^0 і C^0 за ізотермічних та ізобаричних умов дозволяє представити залежність μ від координати та часу на деякому проміжку у вигляді:

$$\mu(z,t) = \mu_0 + k(z)c(z,t), \tag{1.4}$$

де μ_0 — стала матеріалу, яка залежить від значень абсолютної температури T і тиску P; $k(z)$ — коефіцієнт концентраційної залежності хімічного потенціалу, який приймає різні значення k_1 і k_2 відповідно у матриці та прошарку.

Підстановка виразу для дифузійного потоку (1.2), записаного з використанням представлення хімічного потенціалу μ у формі (1.4), в рівняння (1.1) дає:

$$\rho(z)\frac{\partial c(z,t)}{\partial t} = \vec{\nabla}(L(z)k(z)\,\vec{\nabla}c(z,t)) \tag{1.5}$$

Ураховуючи стрибки коефіцієнтів $L(z)$ і $k(z)$ на границях контакту вважаючи їх значення постійними в кожній однозв'язній області тіла, рівнянню (1.1) надано вигляду:

$$\rho(z)\frac{\partial c(z,t)}{\partial t} = d(z)\Delta c(z,t) + \sum[L(z)]_{z=z_1}\delta(z-z_1)k(z)\vec{\nabla}c(z,t) +$$
$$+\sum[k(z)]_{z=z_1}\delta(z-z_1)L(z)\vec{\nabla}c(z,t) \quad (1.6)$$

де $d(z) = L(z)k(z)$ — кінетичний коефіцієнт дифузії.

Рівняння (1.6) можна розглядати як узагальнення другого закону Фіка для багатофазного тіла за неідеальних умов масового контакту. При цьому значення коефіцієнта $k(z)$ визначає величину неусувного розриву першого роду (стрибка) функції концентрації $c(z,t)$.

Таким чином, автором роботи [3] отримано рівняння дифузії, в якому неоднорідності структури тіла враховуються в коефіцієнтах і оператор якого відображає умови неідеального масового контакту на границях розділу фаз.

Якщо допустити, що коефіцієнт концентраційної залежності хімічного потенціалу $k(z)$ є неперервною функцією, то її можна внести під знак стрибка. Тоді рівняння (1.6) набуває вигляду класичного рівняння дифузії при ідеальному масовому контакті на границі розділу фаз:

$$\rho(z)\frac{\partial c(z,t)}{\partial t} = d(z)\Delta c(z,t) + \vec{\nabla}d(z)\vec{\nabla}c(z,t) \quad (1.7)$$

Рівняння можуть застосовуватися і у випадку багатошарових тіл за умовою сумування по всіх границях, де відповідні функції мають розрив.

2 ДИФУЗІЯ В КУСОЧНО-НЕПЕРЕРВНИХ НЕОДНОРІДНИХ СЕРЕДОВИЩАХ ПРИ ПОСЛІДОВНІЙ МОРФОЛОГІЇ КАНАЛІВ

На наш погляд, при розгляді дифузії у шаруватих системах, можливо використання підходів, аналогічних тим, які використовуються у електронній схемотехніці (наприклад, струмів в розгалужених колах і. т. ін.), що в деяких випадках суттєво спрощує розгляд.

Розглянемо шарувату систему, в якій частинки зонду (атоми домішки) можуть не тільки мігрувати, але й розчинюватись у кожному шарі. Приймемо, що шари речовини розташовані перпендикулярно напрямку основного потоку частинок, а процес дифузії домішок є квазіодновимірним, тобто канали, по яким може відбуватися дифузія домішки, розташовані послідовно. Процеси розчинення і дифузії в багатошарових системах подібного типу при припущенні, що розчинення зонда в кожному шарі, наприклад, в разі газів, можуть бути описані за допомогою закону Генрі (відношення концентрацій на кордоні шарів дорівнює відношенню констант розчинності зонда в речовинах суміжних шарів, а на вхідних і вихідній поверхнях шаруватого зразка виконуються граничні умови 1-го роду). При таких припущеннях, стаціонарний потік зонда через багатошарову систему, яка складається з m - різних шарів, може бути записаний у вигляді:

$$\frac{1}{J_{cm}} = \sum_{n=1}^{m} \frac{1}{J_i} = \sum_{n=1}^{m} \frac{l_i}{D_i \Gamma} \ , \tag{2.1}$$

де Γ_i і D_i – коефіцієнт Генрі і коефіцієнт дифузії в кожному шарі, l_i – товщина відповідного шару.

Товщина складеної мембрани

$$L = \sum_{i=1}^{m} l_i \ . \tag{2.2}$$

Константа проникності $P = J_{cm} / p_0$ пов'язана з парціальними константами проникності шарів співвідношенням:

$$\frac{L}{P} = \frac{l_1}{P_1} + \frac{l_2}{P_2} + \cdots \tag{2.3}$$

або

$$\frac{1}{P} = \frac{\sum_{n=1}^{m} \frac{l_i}{P_i}}{L}, \tag{2.4}$$

а константа розчинності:

$$\Gamma = \frac{\sum_{n=1}^{b} l_i \Gamma_i}{\sum_{n=1}^{m} l_i} \tag{2.5}$$

Для опису процесу нестаціонарної проникності, тобто процесу, який протікає в умовах неоднорідності зовнішнього середовища, коли швидко змінюються умови функціонування системи, що роблять істотний вплив на її характеристики зонда через шарувату мембрану необхідно вирішити систему рівнянь:

$$D_i \frac{\partial C_i}{\partial x^2} = \frac{\partial C_i}{\partial t} \tag{2.6}$$

при звичайних крайових умовах, наприклад, методу газопроникності:

$C_i\ \ x, t = 0\ \ = 0$при $l_{i\ -1} \le x \le L_m$

$D_i \frac{\partial C_i(t)}{\partial x} = D_{i=1} \frac{\partial C_{i+1}(t)}{\partial x},\ x = L_i;$

$C_1(x = 0, t) = \Gamma_i p_0; C_m(x = L, t) = 0$

$$\frac{C_i(t)}{C_{i+1}(t)} = \frac{\Gamma_i}{\Gamma_i}, \; x = l_i \qquad (2.7)$$

$$\tau_{зап} = \frac{\frac{l_1^2}{D_1}\left(\frac{l_1}{6\Gamma_1 D_1} + \frac{l_2}{2\Gamma_2 D_2} + \frac{l_3}{2\Gamma_3 D_3}\right)}{\frac{l_1}{\Gamma_1 D_1} + \frac{l_2}{\Gamma_2 D_2} + \frac{l_3}{\Gamma_3 D_3}} + \frac{\frac{l_3^2}{D_3}\left(\frac{l_1}{2\Gamma_1 D_1} + \frac{l_2}{2\Gamma_2 D_2} + \frac{l_3}{6\Gamma_3 D_3}\right) + \left(\frac{\Gamma_1 l_1 l_2 l_3}{D_1 D_3 \Gamma_1 \Gamma_3}\right)}{\frac{l_1}{\Gamma_1 D_1} + \frac{l_1}{\Gamma_2 D_2} + \frac{l_1}{\Gamma_3 D_3}} \qquad (2.8)$$

Час запізнювання $\tau_{зап}$ не залежить від зміни шарів 1 і 3, тобто від напрямку дифузійного потоку, але істотно змінюється при зміні шарів 1 і 2 або 2 та 3. Величини стаціонарного потоку зонда, параметри якого не змінюються в часі, крізь мембрану і константи проникності не залежать від перестановки шарів. Ефективний коефіцієнт дифузії, який характеризує перенесення компонентів через все середовище, наприклад, для складової тришарової мембрані становить:

$$D_{еф} = \frac{L^2}{6\tau_{зап}} \qquad (2.9)$$

У разі шаруватої системи константа розчинності зонда, визначена за формулою $\Gamma = P/D_{еф}$ за означенням не співпадатиме із значенням константи розчинності, отриманої з рівноважних сорбційних експериментів. Ця обставина дозволить відрізнити шарувате середовище від однорідного.

Час запізнювання для двошарової мембрани складає:

$$\tau_{зап} = \frac{\frac{l_1^2}{D_1}\left(\frac{l_1}{6\Gamma_1 D_1} + \frac{l_2}{2\Gamma_2 D_2}\right)}{\frac{l_2}{\Gamma_2 D_2}} + \frac{\frac{l_2^2}{D_2}\left(\frac{l_1}{2\Gamma_1 D_1} + \frac{l_2}{6\Gamma_2 D_2}\right)}{\frac{l_1}{\Gamma_2 D_2}} \qquad (2.10)$$

З симетрії цієї формули випливає, що величина часу запізнювання не залежить від напрямку потоку. Для тонкого шару *1*, нанесеного на підкладку 2, $\tau_{зап}$ прагне до $\tau_{зап2}$, при досить великих коефіцієнтах дифузії і розчинності зонда в шарі 1. Якщо ж розчинність зонда в шарі 1 мала, то $\tau_{зап}$, двошарової системи істотно зростає в порівнянні з $\tau_{зап2}$.

Аналогічний розрахунок часу запізнювання може бути проведений у випадку багатошарового композиту.

Запропонований нами підхід може бути корисним при конструюванні дифузійних мембран складеного типу з декоруванням властивостей шарів і досягненням таким чином фільтруючих, зокрема дросельних властивостей і т. ін.

3 ПАКЕТ ПРОГРАМ «FLOWRAN»

Слід звернути увагу на існування пакетів програм, які можуть використовуватися при математичному моделюванні для вирішення завдань по опису процесу дифузії в шаруватих системах. Одним з таких є пакет програм "FlowRan" [4].

Програмний засіб «Пакет програм для розрахунку дифузійних потоків у двофазних тілах випадкової шаруватої структури (скорочено – пакет «FlowRan»)» призначений для кількісного і якісного аналізу дифузійних потоків мігруючої речовини у випадково неоднорідних шаруватих тілах з різними конфігураціями фаз; знаходження порівняльних розподілів потоків маси, усереднених за ансамблем конфігурацій фаз, за різних значень параметрів внутрішньої структури та фізичних характеристик середовища; кількісної оцінки парного взаємовпливу включень на усереднений потік маси; дослідження дифузійних потоків у випадкових шаруватих структурах зі стохастичними розмірами включень і представлення результатів як у графічній формі, так і у вигляді таблиць.

Для математичного опису дифузійних, теплових і механічних процесів у багатофазних тілах часто застосовують методи «гомогенізації» неоднорідних структур [5, 6]. Такі методи ґрунтуються на припущеннях, що характерні відстані зміни фізичних параметрів значно більші за характерні розміри неоднорідностей у тілі, а також розташування неоднорідностей в тілі за рівномірним розподілом [7]. У праці [8] для врахування багато масштабності деяких природних утворень під час опису стаціонарних процесів фільтрації у стохастично неоднорідному середовищі запропоновано ставити у відповідність крайовій задачі інтегродеференціальне рівняння. Є.Я. Чапля та О.Ю. Чернуха [7] запропонували підхід до математичного опису процесів масоперенесення у випадково неоднорідних структурах, розміри неоднорідностей в яких можуть бути сумірними з розмірами тіла. Згідно з цим підходом крайову задачу масоперенесення зводять до еквівалентного інтегродиференціального рівняння, а розв’язок знаходять у вигляді ряду Неймана, зручного для процедури усереднення за ансамблем конфігурацій фаз [8–10]. За цим підходом запропонована методологія математичного опису потоків домішкової речовини у випадково неоднорідних шаруватих структурах [10, 11], відповідно до якого на основі рівняння балансу маси одержано рівняння дифузії для функції потоку, а крайові задачі запропоновано формулювати безпосередньо для потоку. За таким підходом отримано розрахункові формули для знаходження усереднених за ансамблем конфігурацій фаз дифузійних потоків у випадково неоднорідних шаруватих тілах для різних ймовірнісних розподілів включень у тілі [11, 12]. На цій основі розроблено пакет програм “FlowRan”.

Пакет «FlowRan» забезпечує розрахунок потоків мігруючої речовини, усереднених за ансамблем конфігурацій фаз, у двофазній шаруватій смузі за рівномірного розподілу фаз в області тіла і ймовірною приповерхневою концентрацією включень біля однієї з меж смуги, на якій діє джерело маси, або у протилежному випадку, а також для найбільш ймовірного розташування включень посередині тіла. Пакет програм «FlowRan» дозволяє розраховувати дифузійні потоки у двофазній смузі зі стохастично розташованими прошарками випадкової товщини за рівномірного або трикутного розподілу на заданому інтервалі, а також визначати кількісний і якісний ефект парного взаємовпливу включень на усереднені потоки маси. Пакет програм «FlowRan» передбачає можливість знаходження порівняльних розподілів усереднених дифузійних потоків залежно від різних значень фізичних характеристик та геометричних параметрів середовища, а також порівняння усереднених потоків з їх аналогами в однорідному тілі.[11]

4 АНОМАЛЬНА ДИФУЗІЯ ТА ФРАКЦІЙНА КІНЕТИКА

В сучасній науці існують системи, які неможливо описати звичайними статистичними методами. Ці методи є неадекватними, у більшості випадків, при дослідженні складних систем. Розподіли, які описують стан системи, хоча й візуально схожі з нормальним або логарифмічно-нормальним розподілом, насправді мають розподіл Парето. Складні системи не можливо описати простими диференційними рівняннями, тому виникла потреба у нових, відмінних від стандартного статистичного аналізу, методах вивчення станів складних систем.

Останнім часом особливий інтерес привертають нелінійні динамічні системи, де реалізуються ідеї детермінованого хаосу і фрактальної геометрії. Їх привабливість зумовлена тим, що закономірності таких систем стають базовими для встановлення суті широкого кола явищ, охоплюючи не тільки фізичні, але і хімічні, геофізичні, біологічні, соціально-економічні системи.

Проникнення ідей фрактальної геометрії в природознавство сформувало нову концепцію - концепцію фракталів. Особливий інтерес в концепції фрактала представляє аналітичний підхід, заснований на використанні математичного апарату дробного інтегродиференціювання, в рамках якого вдається не тільки відтворити відомі, але і отримати принципово нові результати.

4.1 Фрактали

Розвиток сучасної фізики (як теоретичної, так і експериментальної) багато в чому спирається на уявлення про множини, що володіють нецілою розмірністю. Поняття дробової (фрактальної) розмірності було вперше сформульовано в роботах Хаусдорфа [13] і Безиковича [14], яким передували дослідження видатних математиків кінця XIX-початку XX століття, таких, як Кантор, Кох, Серпінський.

Термін фрактальная розмірність став частиною фізичного лексикону близько 25 років тому, починаючи з фундаментальних робіт Мандельброта [15-16] по геометрії випадкових процесів. Безперечною заслугою Мандельброта стала демонстрація надзвичайно широкого кола явищ, що призводять до формування фрактальних множин, а також визначення фрактала як структури, що складається з частин, які в якомусь сенсі подібні цілому [17]. Класичними прикладами фракталів є порізані берегові лінії [18], випадкові тимчасові ряди [19], русла річок [4], траєкторії броунівських часток [4] та ін.

В даний час поняття фрактала сприймається як одна з парадигм сучасної теоретичної фізики[20]. Сплеск робіт по фракталах торкнувся таких напрямків, як нерівноважна термодинаміка [21, 22], теорія динамічного хаосу [21, 23, 24] і гідродинамічної турбулентності [21, 25, 26], дослідження фазових переходів [27, 28] і транспортних явищ [29 -31]. Багатий спектр додатків фрактальної геометрії в теоретичній і експериментальній фізиці обговорюється в збірнику [32], а також в монографіях [33-36]. Виклад математичних основ сучасної фрактальної геометрії можна знайти в [17, 37, 38].

Важливий клас фрактальних об'єктів утворюють безлічі, що описують геометрію протікання, або перколяції. Під перколяцією ми розуміємо випадкове поширення рідини через середовище, причому абстрактні поняття "рідина" і "середовище" можуть бути інтерпретовані відповідно до фізичного змісту завдання [17]. Перколяція є критичним процесом [39], тобто передбачає існування деякого порога, нижче якого поширення рідини обмежено кінцевою областю середовища. Поблизу порога протікання відбувається по фрактальній безлічі, геометрія якого визначається виключно законами критичності. Умова критичності призводить до незалежності геометричних характеристик фрактала від мікроскопічних властивостей середовища. Дане явище може бути інтерпретоване як універсальність фрактальної геометрії перколюючих множин на порозі протікання. Найбільш яскрава формулювання властивості універсальності відома як анзац Александера Орбах (А.О) про рівність спектральної розмірності фрактальної безлічі (тобто ефективного числа його "внутрішніх" ступенів свободи) в точці перколяційного переходу значенням 4/3 у всіх цілих розмірностях *n* не нижче 2 [40, 41]

4.2 Розмірність фракталів

У евклідової геометрії є поняття розмірності: розмірність крапки — нуль, відрізка та кола — одиниця, круга і сфери — два, кулі — три. З одновимірними об'єктами ми пов'язуємо поняття довжини, з двовимірними - площі і так далі. Але як можна уявити собі множину з розмірністю 3/2? Мабуть, для цього потрібно щось проміжне між довжиною і площею, і якщо довжину умовно назвати 1-мірою, а площа - 2-мірою, то потрібна (3/2) -міра.

У 1919 році Ф. Хаусдорф дійсно визначив таку а-міру і на цій основі кожній множині в евклідовому просторі підставив число, назване ним метричною розмірністю. Він же навів перші приклади множин з дробовою розмірністю. Виявилось, що дробову розмірність мають Канторова множина, крива Коха і інші екзотичні об'єкти, до недавнього часу маловідомі за межами математики.

Згідно з означенням фрактальна розмірність n - вимірного простору може бути визначена за допомогою формули

$$D = -\lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\ln N_\varepsilon}{\ln \varepsilon} , \qquad (4.1)$$

де N_ε– число само подібних структур лінійного розміру ε, необхідних для покриття всієї структури;

Оскільки фрактал складається з нескінченного числа елементів, що повторюються, неможливо точно виміряти його довжину. Це означає, що чим точнішим інструментом ми будемо його вимірювати, тим більшою виявиться його довжина. Тоді як гладка евклідова лінія заповнює в точності одновимірний простір, фрактальна лінія виходить за межі одновимірного простору, вторгаючись у двовимірне. Таким чином, фрактальна розмірність кривої Коха знаходитиметься між 1 і 2. Найдивовижнішим виявляється те, що й багато природних об'єктів володіють ніби дробовою розмірністю, хоча, відверто кажучи, для природних об'єктів таку розмірність обчислити неможливо. Правильніше сказати, що в певних діапазонах спостереження природні об'єкти, що виникли в результаті довгої дифузії й абсорбції, схожі на фрактальні множини. Наприклад, розмірність побережжя лежить між 1,01 і 1,6, а кровоносної системи людини — між 3,4 і 3,6 [42].

4.3 Субдифузія і супердифузія

Дробові та фрактальні обчислення (тобто, обчислення похідних і інтегралів довільного дійсного або комплексного порядку) з'явилися важливим інструментом, що застосовується в багатьох областях науки. Ця теорія дозволяє нам вирішувати, аналітично та/або чисельно, фракційні диференціальні рівняння та фракційні диференціальні рівняння у частинних похідних, які можуть описати складні системи. Зокрема, використовується при розгляді аномальних дифузійних процесів.

Останнє явище може бути описано зі статистичної точки зору. Дійсно, в різних складних систем, дифузійні процеси, як правило, перестають бути гауссовими за статистикою, і, таким чином, другий закон Фіка не описує відповідним чином поведінку процесу переносу. Зокрема, спостерігаються відхилення від лінійної залежності середнього квадрата зміщення що характерно для броунівського руху, процес не узгоджується з центральною граничною теоремою і є немарковським за своїм характером. [1].

Аномальна дифузія виявляється в широкому розмаїтті систем, і її особливістю є нелінійне зростання середнього квадрата зміщення у часі, тобто відмінність показника степені *t* від 1:

$$\left\langle x^2 t \right\rangle \propto t^{\gamma}, \tag{4.2}$$

Така залежність є характерною для багатьох систем [39, 41], але можливим є й інший характер залежності від часу , наприклад, логарифмічний [25]. Аномальна дифузія, як показує рівняння (4.2) пов'язана з порушенням центральної граничної теореми, викликаним або широкими розподілами, або далекими кореляціями, що, наприклад, є типовим для самоорганізації систем поблизу критичної точки [39, 40]. Замість цього аномальна дифузія ґрунтується на справедливості узагальненої центральної граничної теореми Леві - Гнеденко [24-26]. Зокрема, широкі просторові стрибки або розподіл часу очікування призводять до негаусовського розподілу і немарковскій часової еволюції системи.

Аномальна дифузія відома з трактату Річардсона про турбулентну дифузію в 1926 році [27], і сьогодні список систем з аномальною динамічною поведінкою досить великий. Ми наведемо лише деякі приклади: перенесення носіїв заряду в аморфних напівпровідниках [28], пористі системи [29], транспорт при фрактальній геометрії [32], довгострокова динаміка послідовностей ДНК [33].

У цьому випадку дробове обчислення використовується для узагальнення лінійного рівняння Фоккера-Планка, справедливого для процесів, які характеризуються співвідношенням (4.1)

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x,t) = D\nabla^2 P(x,t), \tag{4.3}$$

де P (x, t) - щільність ймовірності у просторі x = [x_1, x_2, x_3] і часі t, а D>0 - коефіцієнт дифузії.

Прикладом узагальнення рівняння (4.3) є рівняння

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x,t) = D\nabla^\alpha P^\beta(x,t), \quad -\infty < \alpha \le 2, \ \beta > -1, \tag{4.4}$$

де $\nabla^\alpha P^\beta(x,t)$ представляє собою дробові похідні Лапласіана $\sum_i (\partial^\alpha / \partial x^\alpha)_i$ (i = 1, 2, 3), від нелінійного члена $P^\beta(x,t)$ [34]. Інша узагальнена форма представлена рівнянням, яке враховує також дробову похідну за часом

[35]. Ці дрібно-описані процеси демонструють статистичний закон, виражений рівнянням (4.2).

В теорії турбулентності зазвичай розглядають дивні процеси переносу з показником μ (інваріантний параметр, що характеризує топологію пустот в F), який лежить в межах від 0 до 2,

$$0 \leq \mu \leq 2 \qquad (4.5)$$

При $0 \leq \mu < 1$ говорять про субдифузійний процес перенесення, а при - $1 < \mu \leq 2$ про супердифузійний процес. Введемо також поняття супербалістичного процесу, відповідного умові $\mu > 2$ [43]. Супербалістичні процеси припускають прискорення частинок вздовж траєкторій . Ряд фізичних реалізацій розглянуто в [44, 45].

Нарівні з параметром μ в літературі часто використовують показник H, пов'язаний з μ співвідношенням:

$$\mu = 2H \qquad (4.6)$$

В контексті фрактальних узагальнень випадкового броунівського руху величину H називають показником Херста. За умови (3.7) маємо

$$0 \leq H \leq 1 \qquad (4.7)$$

Легко побачити, що субдифузійні процеси відповідають значенням $0 \leq H < 1/2$, а супердифузійні – значенням $1/2 < H \leq 1$. Величина H визначає фрактальную розмірність траєкторій частинок в області турбулентності [43]:

$$d_w = \frac{1}{H} \quad (d_w \geq 1) \qquad (4.8)$$

4.4 Дробове кінетичне рівняння

4.4.1 Формулювання рівняння

Слідуючи загальним принципам дивної кінетики [48, 49], розглянемо дробове рівняння переносу:

$$\frac{\partial^a \psi}{\partial t^a} = \nabla_r^{2\beta}(\mathcal{B}\psi) \tag{4.9}$$

Щоб уникнути зайвих ускладнень параметр B в рівнянні (4.9) будемо вважати не залежним від координат. Члени з адвекцией для простоти опущені. Радіус вектор r пробігає точки, що лежать на перколюючі фрактальні безлічі F, яка вкладена в евклідів простір E^n розмірністю $n \geq 2$: $r \sim F \subset E^n$. Зовнішнє поле в (4.9) передбачається рівним нулю. Рівняння (4.9) записано в узагальнених (дрібних) похідних як за часом t, ∂^a/∂^a, так і по просторовій(фазовоій) змінній r, $\nabla_r^{2\beta} = \partial^{2\beta}/\partial r^{2\beta}$. Введення дрібних похідних $\frac{\partial^a}{\partial t^a}$ і $\partial^{2\beta}/\partial r^{2\beta}$ в кінетичне рівняння (4.9) дозволяє врахувати ефекти пам'яті (a) і нелокальності (β) в контексті єдиного математичного формалізму.

4.4.2 Дробова похідна за часом

Дробова похідна по часу $\frac{\partial^a}{\partial t^a}$ в лівій частині рівняння (4.9) виражається через оператор Рімана- Ліувілля [35]

$$\frac{\partial^a}{\partial t^a}\psi\ t,r\ = \frac{1}{\Gamma(m-a)}\frac{\partial^m}{\partial t^m}\int_0^t \frac{d\vartheta}{t-\vartheta^{\ 1+a+m}}\psi(\vartheta,r) \tag{4.10}$$

де $m-1 < a \leq m$ при деякому цілому m. Нижня межа інтегрування t = 0 в (4.10) фіксує момент часу t, з якого починається відлік динамічних явищ в середовищі; даний вибір багато в чому носить умовний характер. В силу тотожності Абеля [50] дробова похідна (4.10) переходить в звичайну "цілу" похідну $\partial\psi/\partial t$ при a→1. У статистичній межі a→0 зі співвідношення (4.10) випливає $\partial^0\psi(t,r)/\partial t^0 = \psi(t,r)$. При цілих негативних значеннях a = - n похідна $\partial^{-n}\psi(t,r)/\partial t^{-n}$ відтворює n-кратний інтеграл по t. Можна сказати, що (-a) - кратне дробове диференціювання еквівалентно a-кратному дробовому інтегруванні; в певному сенсі операції дробового диференціювання і інтегрування є взаємно зворотними.

Введення дробової похідної$\partial^a/\partial t^a$ в кінетичне рівняння (4.9) дозволяє врахувати випадкові блукання у фрактальному часу (ВБФЧ) - "тимчасову складову" дивних динамічних процесів в турбулентних середовищах [44]. Відмінною особливістю ВБФЧ служить відсутність будь-яких помітних стрибків у поведінці частинок; при цьому середньоквадратичне зміщення $r^2(t)$ зростає з t як t^a. Параметр t має сенс фрактальної розмірності "активного" часу, в якому реальні блукання частинок виглядають як випадковий процес; інтервал активного часу пропорційний t^a.

4.4.3 Дробова похідна за просторовою змінною

Перейдемо тепер до аналізу "просторової складової" дивних процесів переносу, що відповідає операції $\nabla_r^{2\beta}$ в кінетичному рівнянні (4.9). Будемо вважати, що параметр 2β змінюється в межах від 1 до 2. Розкладемо r по базису з декартових координат x_i, в E^n. Маємо $r = e^i x_i$, де e^i - одиничний вектор у напрямку i=1,...,n. Похідній $\partial^\beta/\partial x_i^\beta$ дробового порядку β назвемо інтегродиференціальних оператор, який визначається згідно:

$$\frac{\partial^\beta}{\partial x_i^\beta}\psi(t,r) = \frac{1}{\Gamma(1-\beta)}\frac{\partial}{\partial x_i}\int_{-\infty}^{x_i}\frac{dx_i'}{(x_i-x_i')^\beta}\psi(t,r') \qquad (4.11)$$

На відміну від (4.10), інтегрування в (4.11) починається не з нуля, а від мінус нескінченності; дане "нормування" пов'язана з припущенням про те, що безліч $F \subset E^n$ перколює, тобто містить великі просторові масштаби. Інтегро-диференційний оператор (3.11) з нескінченою нижньою межею інтегрування прийнято називати оператором Рісса-Вейля [48]. Як і оператор Рімана-Ліувілля, оператор Рісса-Вейля коректно відтворює поняття цілої похідною по x_i при β→1. Разом з тим невласний характер інтегрування в (4.11) значно "покращує" аналітичні властивості оператора Рісса-Вейля за рахунок обнулення відповідних підстановок від нижньої межі [49]. Розглядаючи $\partial^{\beta}/\partial x_i^{\beta}$ як компоненти вектора $\partial^{\beta}/\partial r^{\beta}$, отримаємо природне узагальнення градієнта: $\nabla_r^{\beta} \equiv \partial^{\beta}/\partial r^{\beta} \equiv e^i \partial^{\beta}/\partial x_i^{\beta}$. Операцію $\nabla_r^{2\beta}$ визначимо як скалярний квадрат $\nabla_r^{\beta}\nabla_r^{\beta}$ в базисі e^i .У формальній записі $\nabla_r^{2\beta} = \partial^{2\beta}/\partial r^{2\beta} \equiv \delta^{ik}\partial^{2\beta}/\partial x_i^{\beta}\partial x_k^{\beta}$, де символ Кронекера $\delta^{ik} = e^i e^k$ задає компоненти метричного тензора в декартових координатах. Скалярний множник операторів дробового диференціювання $\nabla_r^{2\beta} = \nabla_r^{\beta}\nabla_r^{\beta}$ можна розглядати як узагальнений лапласіан. При β→1 маємо $\Delta_r = \nabla_r^2$. Зауважимо, що визначення (4.11) має сенс при всіх $0 \leq \beta < 1$; обмеження $1 \leq 2\beta < 2$ накладено для того, щоб скалярний множник $\nabla_r^{\beta}\nabla_r^{\beta}$ мав більш просту аналітичну структуру. Узагальнення на випадок $0 \leq 2\beta < 1$ не становить труднощів, проте в контексті рівняння (4.9) нами обговорюватися не буде. Вперше рівняння переносу з лапласіаном дробового порядку $\Delta_r^{2/3}$ було досліджено Моніним [51, 52] в межах теорії Колмогорова К41: 2β = 2/3.

Дробовий оператор Рісса-Вейля відповідає процесам Леві в просторі змінної $\{r\}$. Процеси Леві є марковськими - вони не знають своєї історії, проте мають властивість нелокальності - сприймають цілі області фазового простору просто як точки. Динаміка частинок в таких областях виглядає як миттєві стрибки - "польоти Леві" - з однієї точки в іншу. Стрибкам відповідає сингулярне ядро $(x_i - x_i')^{-\beta}$ під знаком інтеграла в рівнянні (4.11). Імовірність стрибка на довжину l підпорядковується розподілу Леві [48], що має ступеневий вигляд $\phi(l) \propto 1/l^{1+2\beta}$. Для порівняння, блукання у фрактальному часі припускають експоненціально швидке загасання ймовірності $\phi(l) \propto \exp(-l^2)$, що забезпечує безперервність ВБФЧ по *r*. Процеси Леві, таким чином, допускають помітні скачки з набагато більшою ймовірністю, ніж ВБФЧ. Наслідком цього є розходження середньоквадратичного зміщення частинок в статистиці Леві [48]: $r^2(t) \to \infty$.

Реальні частинки, що мають кінцеву масу, миттєві перельоти з однієї точки простору в іншу, звичайно ж, не виконують. До статистики Леві слід відповідно підходити як до зручної моделі, яка описує явища швидкого когерентного переносу в турбулентних середовищах, наприклад, конвекцію частинок разом з підхопив ним їх циклоном. Розбіжність середньоквадратичного зміщення в процесах Леві може бути усунена накладенням певних просторово-часових зв'язків, що змушують частки "спокійніше" переміщуватися в просторі [48]. Процеси Леві зі зв'язками зазвичай називають блуканнями Леві. Дробове кінетичне рівняння для блукань Леві отримано в [53] з умови про рух частинок зі швидкістю не вище заданої. Альтернативний підхід заснований на інтегруванні кінетичних рівнянь для вільних процесів Леві в уявній нестаціонарної області, розширюється з плином часу [54]. Обійти проблему розходження можна також за допомогою дробової умови нормування, переобумовлючи повну ймовірність в статистиці Леві [55]. Дана умова має бути погодженою з фрактальною геометрією множини F.

5 ФРАКЦІЙНА КІНЕТИКА ТА ПРОЦЕСИ У НАВКОЛИШНЬОМУ СЕРЕДОВИЩІ

Прояви аномальної дифузії в реальних процесах різноманітніші, ніж про це прийнято думати. Зокрема, в динаміці багатьох природних процесів, що подається тимчасовими рядами - змінюються в часі значеннями вимірюваних змінних V (t), можуть бути виділені хаотичні складові, еволюційна динаміка яких описується співвідношеннями, характерними для аномальної дифузії. Найбільш відомий приклад – дифузія частинок у турбулентному потоці, так звана, дифузія Річардсона, якій відповідає показник Херста $H_1 = 3/2$.

Іншим прикладом застосування методів дробового числення для опису процесів, які відбуваються у навколишньому середовищі, є розглянута в роботі [56] задача щодо прогнозування запуску і поширення зсувів, а саме моделювання інфільтрації води (тобто дифузії тиску пори в ґрунті) і динамічних процесів у фрактальних середовищах [57]. У якості альтернативи розглядається фрактальное уявлення часової і просторової похідної (фрактальний порядок тільки в знаменнику похідних), і результати порівнюються з дробовим.

В науці про Землю передбачення зсувів (зміщення похилої площини мас грунту з вершини або схилу узгір'я до підошви під дією сили тяжіння) і виявлення механізму їх запуску є однією із складних проблем. Причин виникнення зсувів існує безліч. Проте в більшості випадків тригер являє собою інтенсивний або тривалий дощ, що призводить до збільшення тиску води в порах грунту.

У літературі існують два типи моделей з допомогою яких можна з прогнозувати запуску зсувів: статистичне або емпіричне моделювання, засноване на порогах опадів, отриманих в результаті аналізу часових рядів денного дощу [57] і геотехнічного моделювання, тобто моделей стійкості схилів, які враховують інфільтрацію води при опадах з урахуванням класичних рівнянь Річардсона. Що стосується поширення зсувів, то в моделях використовується ейлеровий (наприклад, методами кінцевих елементів [58]) або лагранжевий підходи (наприклад, методами молекулярної динаміки [59]). У роботі [60] була вивчена можливість інтеграції між дробовим методом інфільтрації і молекулярної динамікою для моделювання як запуску, так і поширення. Зернистість матеріалу, що змінює порядок дробової похідної, ураховується у рівнянні

$$\frac{\partial^{\delta}}{\partial t^{\delta}}\theta\left(z,t\right)=D\frac{\partial^{2}\theta\left(z,t\right)}{\partial z^{2}}, \tag{5.1}$$

де $\theta(z,t)$ - вміст води в залежності від часу t і глибини шару грунту z, а параметр δ, значення якого лежать у межах 0.5≤δ<1, є похідною дробового порядку для розгляду аномальної субдіффузії; при δ = 1 маємо класичну похідну, тобто нормальну дифузію, і при δ> 1 - супердіффузію.

В роботі [60] розроблена тривимірна модель, в якій зміст води виражається через поровий тиск (що інтерпретується як скалярний поле, яке діє на частинки), збільшення якого викликає зменшення міцності на зрушення. Останнє враховується за допомогою критерію Мора-Кулона, який представляє критерій відмови, заснований на теорії граничної рівноваги. Крім того, враховуються флуктуації, які залежать від положень в залежності від порового тиску. Що стосується взаємодії між частинками, то враховується потенціал Леннарда-Джонса та інші активні сили, такі як гравітація, динамічне тертя і в'язкість також розглядаються. Для поновлення позицій використовується алгоритм Верле . Результати моделювання досить задовільні і, хоча модель, запропонована в [60], все ще досить схематична, результати стимулюють дослідження в цьому напрямку, оскільки ці типи моделювання можуть представляти собою новий метод імітації зсувів, викликаних опадами. Зокрема, результати узгоджуються з поведінкою реальних зсувів, наприклад, можна застосувати метод зворотної швидкості об'ємного переміщення для прогнозування часу відмови (метод Фукузоно). Цікаве поведінка виникає з динамічної і статистичної точок зору. У симуляції спостерігається виникнення таких явищ, як уривки, переломи і вигинання. Нарешті, в моделюється системі спостерігається перехід розподілу приросту середньої енергії від гауссового до степеневого закону, що змінює значення деяких параметрів (і: е:, коефіцієнт в'язкості). Як уже згадувалося, з огляду на, що наше розуміння механізмів запуску обмежена, а альтернативні підходи, засновані на взаємопов'язаних елементах, повинні відтворювати перехід від маси що повільно рухається до катастрофічного вивільненню маси, використання таких математичних методів, як фракційне обчислення, для розуміння нелінійних явищ інфільтрації є перспективним.

ВИСНОВКИ

Явище дифузії виграє як позитивну, так і негативну роль у природних та технологічних процесах.

Рівняння Фіка, яке використовують на практиці для опису процесу дифузії в однофазних системах, не придатне для опису дифузії у складних, зокрема, багатофазних системах та системах з дробною просторовою та часовою вимірністю.

Вивчення дифузійних потоків у випадково неоднорідних тілах, шаруватих системах та інших структурованих системах потребує побудови фізичних моделей та адекватного математичного опису.

У роботі розглянута задача опису дифузії домішкової компоненти у двохфазовій шаруватій системі, яка моделює складне оточення .

Запропонований оригінальний метод розгляду процесу дифузії в кусочно-неперервних неоднорідних середовищах, оснований на аналогії з методами, що використовуються у електронній схемотехніці. Метод використаний для розгляду дифузії при послідовному розташуванні шарів, крізь які відбувається квазіодновимірний процес дифузії домішок. Зроблений висновок, про те, що подальший аналіз може полягати в конструюванні дифузних мембран складеного типу з декоруванням властивостей шарів і досягненням таким чином фільтруючих, зокрема дросельних властивостей і т. ін.

Розглянуто застосування дробового обчислення щодо узагальнення дифузійного диференціального рівняння у частинних похідних, яке використовується при розгляді аномальних дифузійних процесів у складних системах. Наведені приклади застосування методів дробового числення для опису процесів, які відбуваються у навколишньому середовищі.

Результати роботи доповідались у травні 2017р. на Конференції молодих вчених [61].

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. В. Артемчук, Ю. Михайленко, Н. Мухіна, О. Саблін, Р. Ганич. Обґрунтування використання та механічні властивості шаруватих металевих композицій. Вісник Дніпропетровського нац. ун-ту залізничного транспорту ім. акад. В. Лазаряна. 2012. Вип. 42. С. 60-69.
2. Igor M, Joseph K, Fractional Kinetics // Physics Today. 2002. № 55. С. 48-51.
3. Гиббс Д. В. Термодинамика. Статистическая физика. Москва: Наука, 1982. 584 с.
4. Чернуха О.Ю., Гончарук В.Є., Білущак Ю.І., Давидов А.Є. Пакет програм «FLOWRAN» для дослідження дифузійних потоків у випадкових шаруватих системах // Математичні машини і системи. 2016. № 1. С. 107-110
5. Б. Гамбин, Л. Назаренко, Е. Телега. Стохастическая гомогенизация уравнений стационарной термоупругости. Доповіді НАН України. 2002. № 10. С. 37 – 44.
6. A. Galka, J.J. Telega, R. Wojnar. Thermodiffusion in heterogeneous elastic solids and homogenization. Arch. Mech. 1994. Vol. 46, № 3. P. 267 – 314.
7. Хорошун Л.П. Термоупругость двухкомпонентных смесей Л.П. Хорошун, Н.С. Солтанов. К.: Наукова думка, 1984. 112 с.
8. Фильтрация жидкостей в многомасштабных пористых середах О.Л. Кузнецов, А.В. Каракин, Ю.А. Кухаренко [и др.] Геоинформатика. 2001. № 4. С. 11 – 15.
9. Є.Я. Чапля, О.Ю. Чернуха. Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах. К.: Наукова думка, 2009. 302 с.
10. Є. Чапля, О. Чернуха, Н. Васьо. Математичне моделювання потоків у шарі. Вісник Львів. ун-ту. (Серія «Прикл. матем. інформ.»). 2010. Вип. 15.С. 103 – 115.

11.Чапля Є.Я. Математичне моделювання дифузійних потоків у випадково неоднорідній шаруватій смузі Є.Я. Чапля, О.Ю. Чернуха, А.Є. Давидок Доповіді НАН України. 2012. № 11. С. 40 – 46.

12. Чернуха О.Ю. Моделювання дифузійних потоків у двофазній багатошаровій випадково неоднорідній смузі за рівномірного розподілу фаз О.Ю. Чернуха, А.Є. Давидок Прикладні проблеми механіки і математики. 2013. Вип. 11. С. 142 − 150.

13.Besicovitch A S Math. Ann. 101 161 (1929)

14. Mandelbrot B B Science 155 636 (1967)

15.Paladin G, Vulpiani A Phys. Rep. 156 147 (1987)

16. Заславский Г М, Сагдеев Р З Введение в нелинейную физику: от маятника до турбулентности и хаоса (М.: Наука, 1988)

17.HausdorffF Math. Ann. 79 157(1919)

18.Я. Й., Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю. Континуально-термодинамічні моделі механіки твердих розчинів. Київ: Наукова думка, 2006. 272 с.

19.Мюнстер А. Химическая термодинамика. Москва: Мир, 1971. 295 с.

20.В.Д. Проничкин, О.И. герасымов, А.В. Игнатов. Физика твердого тела/ образование неупорядоченной сетки высокоомных каналов в полупроводниковых пленках. Том 31, 1989

21. Paladin G, Vulpiani A Phys. Rep. 156 147 (1987)

22. Заславский Г М, Сагдеев Р З Введение в нелинейную физику: от маятника до турбулентности и хаоса (М.: Наука, 1988)

23. Crownover R M Introduction to Fractals and Chaos (Boston: Jones and Bartlett, 1995) Кроновер Р М Фракталыt и хаос в динамических системах. Основы теории (М.: Постмаркет, 2000)

24. Sreenivasan K R, Prasad R R C Physica D 38 322 (1986)

25. Frisch U Turbulence. The Legacy of A.N. Kolmogorov (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1995) Фриш У Турбулентность. Наследие Колмогорова (М.: ФАЗИС, 1998)

26. GefenY, MandelbrotBB,AharonyA Phys. Rev. Lett. 45 855 (1980)

27. Suzuki M Prog. Theor. Phys. 69 65 (1983)

28. Havlin S, ben-Avraham D Adv. Phys. 36 695 (1987)

29. ben-Avraham D, Havlin S Diffusion and Reactions in Fractals and Disordered Systems (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2000)

30. Bouchaud J-P, Georges A Phys. Rep. 195 127 (1990)

31. Aharony A, Feder J (Eds) Fractals in Physics'. Essays in Honour of Benoit B. Mandelbrot. Proc of the Intern. Conf. Honouring Benoit B. Mandelbrot on His 65th Birthday, Vence, France, 1-4 October 1989 (Amsterdam. North-Holland, 1990)

32. Фракталы в физике (Под ред. Л Пьетронеро, Э Тозатти) (М.: Мир, 1988)

33. Takayasu H Fractals in the Physical Sciences (Manchester. Manchester Univ. Press, 1990)

34. Le Mehaute A Fractal Geometries. Theory and Applications (Boca Raton. CRC Press, 1991)

35. Schroeder M R Fractals, Chaos, Power Laws'. Minutes from an Infinite Paradise (New York. W.H. Freeman, 1991) Шредер М Фракталыt, хаос, степенныге законы. Миниатюры из бесконечно¬го рая (Ижевск: РХД, 2001)

36. Морозов А. Д. Введение в теорию фракталов (М.-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2002)

37. Божокин С В, Паршин Д А Фракталыt и мультифракталы (Ижевск: РХД, 2001)

38. Isichenko M B Rev. Mod. Phys. 64 961 (1992)

39. Nakayama T, Yakubo K, Orbach R L Rev. Mod. Phys. 66 381(1994)

40. Alexander S., Orbach R L J. Phys. Lett. (Paris) 43 L625 (1982)

41. Фоменко А. Т. Наглядная геометрия и топология. М.: изд-во МГУ, 1993.

42. Coleman P H, Pietronero L Phys. Rep. 213 311 (1992)

43. Zimbardo G, Greco A, Veltri P Phys. Plasmas 7 1071 (2000)

44. Zimbardo G, Veltri P, Pommois P Phys. Rev. E 61 1940 (2000)

45. van Kämpen N G Stochastic Processes in Physics and Chemistry (Amsterdam: North-Holland, 1981) Ван Кампен Н Г Стохастические процессы в физике и химии (М.: Высшая школа, 1990)
46. Gefen Y, Aharony A, Alexander S Phys. Rev. Lett. 50 77 (1983)
47. Metzler R, Klafter J Phys. Rep. 339 1 (2000)
48. Zaslavsky G M Phys. Rep. 371 461 (2002)
49. Владимиров В. С. Уравнения математической физики 5-е изд. (М.: Наука, 1988)
50. Монин А С ДАН СССР 105 256(1955)
51. Монин А С, Яглом А М Статистическая гидромеханика Ч. 2 (М.: Наука, 1967)
52. Забурдаев В Ю, Чукбар К В ЖЭТФ 121 299 (2002)
53. Jespersen S, Metzler R, Fogedby H C Phys. Rev. E 59 2736 (1999
54. Милованов А В, докт. физ.-мат. наук (М.: Институт космических исследований, 2003)
55. Я. Й., Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю. Континуально-термодинамічні моделі механіки твердих розчинів. Київ: Наукова думка, 2006. 272 с.
56. V.E. Tarasov, Fractional Hydrodynamic Equations for Fractal Media, Annals of Physics, 318(2), 286-307, 2005.
57. G. Martelloni, S. Segoni, R. Fanti, F. Catani, Rainfall thresholds for the forecasting of landslide occurrence atregional scale. Landslides Journal, 9(4), P. 485-495, 2012.
58. A. Patra, A. Bauer, C. Nichita, E. Pitman, M. Sheridan, M. Bursik, et al., Parallel adaptive numerical simulation of dry avalanches over natural terrain, J Volcanol Geotherm Res, P. 1–21, 2005.
59. E. Massaro, G. Martelloni, F. Bagnoli, Particle based method for shallow landslides: modeling sliding surface lubrification by rainfall, CMSIM International Journal of Nonlinear Scienze ISSN 2241-0503, P. 147-158, 2011.

60. G. Martelloni, F. Bagnoli, Particle-based models for hydrologically triggered deep seated landslides, In: EGU General Assembly 2013, Vienna (AT), Vol. 15, EGU2013-10599-1.

61. Матеріали наукової конференції молодих вчених. Фракційно-кінетичиий сценарій еволюції систем із складою морфологією . ОДЕКУ, Х.: ФОП Панов А.М., 2017. С. 143.