

УДК 537.624

КП

№ госрегистрации 0112U001383.

Инв. №

Министерство образования и науки Украины
Сумский государственный университет
(СумГУ)

40007, г. Сумы, ул. Римского-Корсакова, 2;
тел. (0542) 33 41 08, факс (0542) 33 40 49

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе
д.ф.-м.н., профессор

_____ А. Н. Черноус

ОТЧЕТ
О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ
**АНОМАЛЬНЫЕ ДИФФУЗИОННЫЕ И РЕЛАКСАЦИОННЫЕ
СВОЙСТВА КЛАССИЧЕСКИХ И КВАНТОВЫХ БЛУЖДЕНИЙ С
НЕПРЕРЫВНЫМ ВРЕМЕНЕМ**
(заключительный)

Начальник НИЧ
к.ф.-м.н., с.н.с.

Д. И. Курбатов

Руководитель НИР
д.ф.-м.н., профессор

С. И. Денисов

(2014.11.27)

2014

Рукопись закончена 19 декабря 2014 г.
Результаты работы рассмотрены на заседании научного совета СумГУ,
протокол № 4 от 2014.11.27

СПИСОК АВТОРОВ

Руководитель НИР, главный научный сотрудник д.ф.-м.н., профессор	2014.12.19	С. И. Денисов (реферат, введение, разделы 1-5, выводы)
Заведующий лабораторией к.ф.-м.н., доцент	2014.12.19	Т. В. Лютый (реферат, введение, разделы 3, 5, выводы)
Старший научный сотрудник к.ф.-м.н., доцент	2014.12.19	Е. С. Денисова (раздел 4, выводы)
Научный сотрудник, к.ф.-м.н.	2014.12.19	А. Ю. Поляков (раздел 5, выводы)
Младший научный сотрудник, аспирант	2014.12.19	Ю. С. Быстрик (реферат, разделы 1-2, выводы)
Младший научный сотрудник, аспирант	2014.12.19	В. В. Рева (введение, раздел 5, выводы)
Лаборант, студент	2014.12.19	Б. А. Педченко (раздел 3, выводы)

РЕФЕРАТ

Отчёт о НИР: 139 с., 25 рис., 1 табл., 131 источник.

Объект исследования — неравновесные системы, временная эволюция параметров состояния которых описывается случайными блужданиями с непрерывным временем или стохастическими уравнениями Ланжевена.

Предмет исследования — диффузионные, релаксационные, магнитные и структурные свойства этих систем.

Цель исследования — разработка аналитических и численных методов для 1) нахождения законов сверхмедленной диффузии, 2) нахождения законов медленной и сверхмедленной релаксации, 3) изучения стохастической динамики намагниченности наночастиц, порождаемой негауссовскими шумами, и 4) определения магнитных и структурных свойств феррожидкостей.

Методы исследования — методы статистической и математической физики, стохастические методы, асимптотические методы, методы численного моделирования и параллельного программирования.

В работе, используя концепцию случайных блужданий с непрерывным временем, найдены общие законы сверхмедленной диффузии для широкого круга стохастических систем и законы немонотонной, медленной и сверхмедленной релаксации для двухуровневых систем. Путем аналитического решения уравнений Максвелла выведено эффективное уравнение Ландау-Лифшица-Гильберта для описания динамики намагниченности проводящих наночастиц. Разработаны аналитические и численные методы расчета статистических характеристик систем, возмущенных пуассоновским шумом. Предложен модифицированный метод молекулярной динамики, который базируется на алгоритме Барнса-Хата и технологии CUDA, для моделирования магнитных и структурных свойств феррожидкостей.

Результаты НИР имеют большой потенциал применений в микроэлектронике и биомедицине, и могут быть использованы при подготовке специалистов физико-математического профиля.

СЛУЧАЙНЫЕ ПРОЦЕССЫ, АНОМАЛЬНАЯ ДИФФУЗИЯ И РЕЛАКСАЦИЯ, ДИХОТОМИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ, МАГНИТНЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ, ФЕРРОЖИДКОСТИ, ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, ПАРАЛЛЕЛЬНОЕ ПРОГРАММИРОВАНИЕ.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	7
1 АСИМПТОТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ И АНОМАЛЬНАЯ ДИФ- ФУЗИЯ ДЛЯ НЕПРЕРЫВНЫХ ВО ВРЕМЕНИ СЛУЧАЙ- НЫХ БЛУЖДАНИЙ	8
1.1 Описание модели и предыдущие результаты	9
1.2 Предельная плотность вероятности и соответствующие масштаби- руемые функции	15
1.2.1 Представление $\mathcal{P}(\mathbf{y})$ в виде обратного преобразования Фурье	15
1.2.2 Распределения длины скачка с $l_1 \neq 0$	17
1.2.3 Распределения длины скачка с $\alpha \in (1, 2)$ и $l_1 = 0$	18
1.2.4 Распределения длины скачка с $\alpha \in (0, 1)$	20
1.2.5 Распределения длины скачка с $\alpha = 1$	21
1.2.6 Распределения длины скачка с $\alpha = 2$	22
1.3 Альтернативные представления $\mathcal{P}(\mathbf{y})$	24
1.3.1 Плотность вероятности $\mathcal{P}(\mathbf{y})$ в терминах обратного пре- образования Меллина	24
1.3.2 Плотность вероятности $\mathcal{P}(\mathbf{y})$ в терминах преобразова- ния Лапласа	29
1.3.3 Представление $\mathcal{P}(\mathbf{y})$ в виде H -функций Фокса	35
1.3.4 Представление $\mathcal{P}(\mathbf{y})$ в виде ряда	38
1.4 Поведение $\mathcal{P}(\mathbf{y})$ на малых и больших расстояниях	41
1.5 Дробное уравнение для $\mathcal{P}(\mathbf{y})$	44
1.6 Законы аномальной диффузии для изучаемых блужданий	45
1.7 Численное моделирование изучаемых блужданий	48
1.7.1 Алгоритм	48
1.7.2 Примеры моделирования предельной плотности $\mathcal{P}(\mathbf{y})$	50

1.7.3	Примеры моделирования дисперсии положения $X(t)$	53
1.8	Выводы к разделу 1	54
2	РЕЖИМЫ РЕЛАКСАЦИИ В ДВУХУРОВНЕВЫХ СИСТЕМАХ	56
2.1	Дихотомическая модель релаксации	57
2.1.1	Описание модели	57
2.1.2	Общие результаты	59
2.2	Законы релаксации	65
2.2.1	Точные результаты	65
2.2.2	Асимптотические результаты	69
2.3	Выводы к разделу 2	72
3	ВЛИЯНИЕ ИНДУКЦИОННЫХ ТОКОВ ПРОВОДИМОСТИ НА ДИНАМИКУ НАМАГНИЧЕННОСТИ В ОДНОДОМЕННЫХ НАНОЧАСТИЦАХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ФЕРРОМАГНЕТИКОВ	73
3.1	Вывод эффективного уравнения Ландау-Лифшица-Гильберта для металлических наночастиц	74
3.1.1	Модель и базовые уравнения	74
3.1.2	Решение уравнений Максвелла для индукционного электрического поля	77
3.1.3	Решение уравнений Максвелла для магнитного поля индукционных токов	78
3.1.4	Эффективное уравнение Ландау-Лифшица-Гильберта	80
3.2	Влияние индукционных электрических токов на магнитные свойства наночастиц	82
3.2.1	Прецессионное переключение намагниченности в металлических наночастицах	82
3.2.2	Влияние проводимости на энергию диссипации в системах наночастиц с равномерным распределением направлений их осей легкого намагничивания	85

3.3	Выводы к разделу 3	90
4	СТАТИСТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА УРАВНЕНИЯ ЛАНДАУ-ЛИФШИЦА С БЕЛЫМ ШУМОМ ПУАССОНА	92
4.1	Модифицированное уравнение Ландау-Лифшица	93
4.2	Обобщенное уравнение Фоккера-Планка	97
4.3	Анализ обобщенного уравнения Фоккера-Планка	99
4.4	Выводы к разделу 4	100
5	МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ФЕРРОРИЖИДКОСТЕЙ С ПОМОЩЬЮ УСОВЕРШЕНСТВОВАННОГО МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ	102
5.1	Описание модели	103
5.2	Технологии численного моделирования	110
5.2.1	Параллельные вычисления с использованием графических процессоров (GPU)	110
5.2.2	All-Pair алгоритм	112
5.2.3	Применение алгоритма Барнса-Хата	113
5.2.4	Верификация и предварительные численные результаты ...	117
5.3	Результаты и анализ проведенных исследований	119
5.4	Выводы к разделу 5	125
	ВЫВОДЫ	127
	ПЕРЕЧЕНЬ ССЫЛОК	129

ВВЕДЕНИЕ

Поскольку в любой физической системе в той или иной степени всегда присутствуют внутренние и/или внешние флуктуации, описание таких систем по необходимости должно быть вероятностным. Среди огромного разнообразия моделей, используемых для этой цели, в данной НИР основное внимание сосредоточено на изучении двух стохастических моделей, широко используемых как в физике, так и в химии, биологии, экономике и других науках. Это случайные блуждания с непрерывным временем, образующие особый класс скачкообразных процессов, и случайные процессы, которые можно интерпретировать как решение системы стохастических уравнение Ланжевена. Так как подробное описание этих моделей и изучаемых систем проведено во вводной части каждого раздела, ниже мы лишь перечислим проблемы, решаемые в данной работе.

В разделе 1 изучены случайные блуждания с непрерывным временем, характеризующиеся тяжелыми хвостами распределений величин скачков частицы и сверхтяжелыми хвостами распределений времен ожидания между последовательными скачками. Для таких случайных блужданий найдены предельные функции распределения и с их помощью построена теория сверхмедленной диффузии. Метод случайных блужданий применен и в разделе 2 для описания медленной и сверхмедленной релаксации двухуровневых систем, чьи структурные элементы изменяются со временем как реализации дихотомического процесса. Эффективное уравнение Ландау-Лифшица-Гильберта, описывающее динамику намагниченности наночастиц проводящих ферромагнетиков, выведено в разделе 3 путем аналитического решения уравнений Максвелла. Это детерминистическое уравнение является базовым для изучения флуктуационных эффектов в таких системах с помощью соответствующих уравнений Ланжевена. В разделе 4 разработаны аналитические и численные методы расчета статистических характеристик систем, которые описываются уравнениями Ланжевена с пуассоновскими шумами. Наконец, в разделе 5 разработан усовершенствованный метод молекулярной динамики, основанный на алгоритме Барнса-Хата и технологии параллельных вычислений, который позволяет изучать статистическое поведение большого числа взаимодействующих наночастиц, находящихся в вязкой среде, с помощью персональных компьютеров.

1 АСИМПТОТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ И АНОМАЛЬНАЯ ДИФФУЗИЯ ДЛЯ НЕПРЕРЫВНЫХ ВО ВРЕМЕНИ СЛУЧАЙНЫХ БЛУЖДАНИЙ

Непрерывные во времени случайные блуждания¹ — это специальный класс кумулятивных скачкообразных процессов, которые характеризуются двумя случайными величинами, а именно: величиной скачка блуждающей частицы и временем ожидания между последовательными скачками. Поскольку для многих систем свойственны случайные величины, которые можно интерпретировать, как время между успешными переходами (скачками) системы в новое состояние и мерой перехода (величиной скачка), то СТ R W представляют удобную и гибкую модель для исследования разнообразных стохастических явлений. Так, например, СТ R W используются для описания аномальной диффузии и переноса вещества в неупорядоченных средах [1–4], изучения миграции [5, 6], анализа финансовых [7–10] и сейсмических [11, 12] данных.

Впервые СТ R W были представлены Э. Монролом и Дж. Вейссом в 1965 году в работе [13] (см. также обзоры [2, 3]), и согласно их теории плотность вероятности $P(x, t)$ положения $X(t)$ блуждающей частицы зависит только от её совместной плотности вероятности времени ожидания и величины скачка. Заметим, что в общем случае положение частицы $X(t)$ есть n -мерный вектор, т. е. под длиной скачка подразумеваются величины перемещения вдоль пространственных осей координат. Однако, когда движение вдоль различных направлений независимо, достаточно рассматривать одномерную модель. Более того, часто особый интерес представляет несвязанный (decoupled) случай, при котором времена ожидания и длины скачков не зависят друг от друга. В этой ситуации вместо совместной плотности мы имеем независимые друг от друга плотность вероятности $p(\tau)$ времени ожидания между скачками и плотность вероятности $w(\xi)$ величины скачка. Тем не менее, даже в простой одномерной ситуации несвязанного блуждания точные решения найдены только для некоторых частных случаев [14–16]. Зато асимптотическое (во времени) поведение плотности веро-

¹ В научной литературе общепринятым сокращением для такого рода процессов сокращением есть СТ R W (continuous-time random walk), поэтому далее в тексте будем использовать эту аббревиатуру.

ятности $P(x, t)$, которое определяет диффузионные и транспортные свойства блуждающих частиц, было изучено гораздо лучше [17–21].

Под асимптотическим решением имеется ввиду плотность вероятности специальным образом масштабированного положения частицы $Y(t) = a(t)X(t)$ при $t \rightarrow \infty$, где $a(t)$ — масштабирующая функция, выбор которой зависит от поведения на бесконечности $p(\tau)$ и $w(\xi)$ и осуществляется таким образом, чтобы плотность вероятности для $Y(t)$ была невырожденной. Такие решения приведены, в частности, для всех несвязанных плотностей вероятности времени ожидания и длины скачка, которые имеют конечный момент второго порядка или тяжёлые хвосты [20].

К тому же, возникает интерес исследования СТРУ со сверхтяжёлыми хвостами распределения времени ожидания [22]. Поскольку все дробные моменты таких распределений бесконечны, то этот случай оказывается очень удобным для моделирования аномального поведения многих систем и процессов, таких как итерационные отображения [23], ультрамедленная кинетика [24], сверхмедленная диффузия [25], динамика Ланжевена [26, 27]. Для СТРУ, которые характеризуются произвольными сверхтяжёлыми распределениями вероятности времени ожидания, соответствующие масштабирующие функции $a(t)$ и предельные (по времени) плотности вероятности $\mathcal{P}(y)$ нового положения частицы $Y(t)$ при $t \rightarrow \infty$ были недавно получены для распределений величины скачка с конечными моментами второго порядка [28] и для симметричных распределений величины скачка с тяжёлыми хвостами [29].

В данной работе (см. также [30] и [31]) мы продолжаем предыдущие исследования и представляем детальное аналитическое и численное исследование СТРУ со сверхтяжёлыми плотностями вероятности времени ожидания и тяжёлыми асимметрическими плотностями вероятности длины скачка.

1.1 Описание модели и предыдущие результаты

Одной из наиболее важных статистических характеристик для случайных блужданий является предельная плотность вероятности определённым

образом масштабированного положения частицы при больших значениях времени, поскольку именно она отвечает за наиболее важные транспортные свойства изучаемых явлений. При описании таких явлений под большим значением времени удобно подразумевать $t \rightarrow \infty$, что влечёт за собой и условие $N \rightarrow \infty$ (где N — количество скачков за соответствующий промежуток времени). Исходя из этого, необходимые решения можно получить используя обобщённые центральные предельные теоремы [32, 33], которые позволяют установить закон распределения интересующего нас положения частицы именно в предположении $N \rightarrow \infty$. Однако, понятно, что с физической точки зрения условие $t \rightarrow \infty$ (а поэтому и $N \rightarrow \infty$) являются лишь полезной абстракцией, и на самом деле мы всегда будем иметь дело с конечным значением t , пусть оно и очень большое. Отсюда следовало бы утверждать, что и число скачков за это время на самом деле будет конечное большое число. Тем не менее, это суждение не выполняется в случае сверхмедленных блужданий, для которых за сколь угодно большой промежуток времени частица может не сдвинуться с места, т. е. при большом t величина N может быть малого порядка (в среднем). Следовательно, для сверхмедленных блужданий полученные на основе центральных предельных теорем результаты могут оказаться довольно грубыми. Таким образом, для как можно более точного описания сверхмедленных случайных процессов желательно искать решения с помощью подхода, который не требует допущения значительного числа скачков. В таком случае вместо центральных предельных теорем следует использовать формализм непрерывных во времени случайных блужданий (CTRW), и искать их асимптотические по времени распределения.

Для несвязанных CTRW, когда множества времён ожидания между последовательными скачками $\{\tau_n\}$ и длин скачков $\{\xi_n\}$ не зависят друг от друга, плотность вероятности $P(x, t)$ положения частички $X(t)$ в пространстве Фурье-Лапласа даётся уравнением Монролла-Вейсса [13]

$$P_{ks} = \frac{1 - p_s}{s(1 - p_s w_k)}. \quad (1.1)$$

Здесь $w_k = \mathcal{F}\{w(\xi)\} = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{ik\xi} w(\xi)$ ($-\infty < k < \infty$) — преобразование

Фурье для плотности $w(\xi)$, $p_s = \mathcal{L}\{p(\tau)\} = \int_0^\infty d\tau e^{-s\tau} p(\tau)$ ($\text{Res} > 0$) – преобразование Лапласа для $p(\tau)$, и $P_{ks} = \mathcal{F}\{\mathcal{L}\{P(x, t)\}\}$.

Представляя уравнение (1.1) в форме

$$P_{ks} = \frac{1 - p_s}{s} + \frac{(1 - p_s)p_s w_k}{s(1 - p_s w_k)} \quad (1.2)$$

и применяя к последнему выражению обратное преобразование Фурье [$\mathcal{F}^{-1}\{f_k\} = f(x) = (2\pi)^{-1} \int_{-\infty}^\infty dk e^{-ikx} f_k$], получаем

$$P_s(x) = \frac{1 - p_s}{s} \delta(x) + \frac{(1 - p_s)p_s}{s} \mathcal{F}^{-1}\left\{\frac{w_k}{1 - p_s w_k}\right\}, \quad (1.3)$$

где $\delta(\cdot)$ – дельта-функция Дирака. Тогда, используя обратное преобразование Лапласа [$\mathcal{L}^{-1}\{g_s\} = g(t) = (2\pi i)^{-1} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds e^{st} g_s$, c – действительное число, превосходящее действительные части всех сингулярностей g_s] к формуле (1.3), для плотности вероятности положения частицы находим

$$P(x, t) = V(t)\delta(x) + \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{(1 - p_s)p_s}{s} \mathcal{F}^{-1}\left\{\frac{w_k}{1 - p_s w_k}\right\}\right\}, \quad (1.4)$$

где

$$V(t) = \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{1 - p_s}{s}\right\} = \int_t^\infty d\tau p(\tau) \quad (1.5)$$

– вероятность того, что за время t частичка не совершит скачка, т. е. останется в начальном положении $X(0) = 0$. Согласно определению (1.5), эта вероятность удовлетворяет условию $V(t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$ и $V(t) \rightarrow 1$ при $t \rightarrow 0$.

Поскольку мы полагаем, что $X(0) = 0$, то начальным условием есть $P(x, t) = \delta(x)$. Также, если граничные условия специально не оговариваются, то мы считаем $P(x, t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$ для всех x . Из этого следует, что вероятность нахождения частички в любом интервале является нулевой, т. е. будет казаться, что искомое распределение есть равномерным.

Это подталкивает нас при больших временах ввести масштабированную координату $Y(t) = a(t)X(t)$ со специально подобранной масштабиру-

ющей функцией $a(t) \rightarrow \infty$. Следовательно, теперь нам нужно вместо плотности $P(x, t)$ рассматривать асимптотическое поведение плотности вероятности $\mathcal{P}(y, t) = a^{-1}(t)P(y/a(t), t)$ положения $Y(t)$. При этом функцию $a(t)$ нужно выбрать таким образом, чтобы существовал предел

$$\mathcal{P}(y) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{a(t)} P\left(\frac{y}{a(t)}, t\right). \quad (1.6)$$

В случае слишком быстрого стремления $a(t)$ к нулю $\mathcal{P}(y) = \delta(y)$, если же $a(t)$ стремится к нулю недостаточно быстро, то $\mathcal{P}(y) \rightarrow 0$. Тем не менее, можно найти специальный класс асимптотического поведения $a(t)$, для которого предельные вероятности будут невырожденными. При этом предельная плотность $\mathcal{P}(y)$ и масштабирующая функция $a(t)$ определяют поведение оригинальной плотности вероятности при больших значениях времени, а именно $P(x, t) \sim a(t)\mathcal{P}(a(t)x)$ при $t \rightarrow \infty$. Во избежание недопонимания, заметим, что последнее соотношение справедливо только для $\mathcal{P}(y) \neq 0$; в других областях y , где $\mathcal{P}(y) = 0$ (см. детали ниже), использование предельной плотности вероятности для нахождения поведения $P(x, t)$ при больших временах становится некорректным.

Для сверхмедленных блужданий (т. е. при сверхтяжёлых распределениях времён ожидания) эта задача недавно решена для несвязанной модели STRW с плотностями вероятности длины скачка с конечными моментами второго порядка [28] или с симметрическими тяжёлыми плотностями длины скачка [29].

Сверхтяжёлые распределения времени ожидания характеризуются следующим асимптотическим поведением

$$p(\tau) \sim \frac{h(\tau)}{\tau} \quad (\tau \rightarrow \infty), \quad (1.7)$$

где $h(\tau)$ — это медленно меняющаяся на бесконечности функция, т. е. $h(\mu\tau) \sim h(\tau)$ при $\tau \rightarrow \infty$ для всех $\mu > 0$. Поскольку $p(\tau)$ нормирована ($\int_0^\infty d\tau p(\tau) = 1$), то функция $h(\tau)$ должна удовлетворять условию $h(\tau) = o(1/\ln \tau)$ при $\tau \rightarrow \infty$.

Главная особенность таких плотностей состоит в том, что все их дроб-

ные моменты $\int_0^\infty d\tau \tau^c p(\tau)$ бесконечны при всех $c > 0$. Показано [27], что если $p(\tau)$ имеет сверхтяжёлые хвосты и $w(\xi)$ имеет конечный момент второго порядка $l_2 = \int_{-\infty}^\infty d\xi \xi^2 w(\xi)$, тогда

$$\mathcal{P}(y) = \frac{2 - \delta_{l_1,0}}{2} e^{-|y|} H(l_1 y) \quad (1.8)$$

и

$$a(t) \sim \begin{cases} \sqrt{2V(t)/l_2}, & l_1 = 0 \\ V(t)/|l_1|, & l_1 \neq 0 \end{cases} \quad (1.9)$$

при $t \rightarrow \infty$. Здесь $\delta_{a,b}$ – символ Кронекера ($\delta_{a,b} = 1$, если $a = b$ и $\delta_{a,b} = 0$, если $a \neq b$) и $H(x)$ – функция Хевисайда [$H(x) = 1$, если $x \geq 0$ и $H(x) = 0$, если $x < 0$], и $l_1 = \int_{-\infty}^\infty d\xi \xi w(\xi)$ – момент первого порядка $w(\xi)$. Заметим, что если $l_1 \neq 0$, тогда предельная плотность вероятности односторонняя: $\mathcal{P}(y) = 0$ на той полуоси y , где $l_1 y < 0$.

Если плотность вероятности величины скачка симметричная $w(-\xi) = w(\xi)$ и имеет тяжёлые хвосты, то

$$w(\xi) \sim \frac{u}{|\xi|^{1+\alpha}} \quad (|\xi| \rightarrow \infty), \quad (1.10)$$

где константа $u > 0$ и хвостовой параметр $\alpha \in (0, 2]$. Согласно работе [29] в этом случае предельная плотность вероятности может быть записана в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(y) &= \frac{1}{\alpha} H_{2,3}^{2,1} \left[|y| \left| \begin{array}{l} (1 - 1/\alpha, 1/\alpha), (1/2, 1/2) \\ (0, 1), (1 - 1/\alpha, 1/\alpha), (1/2, 1/2) \end{array} \right. \right] \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dx e^{-|y|x} \frac{\sin(\pi\alpha/2)x^\alpha}{1 + 2\cos(\pi\alpha/2)x^\alpha + x^{2\alpha}} \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dx \frac{\cos(yx)}{1 + x^\alpha} \end{aligned} \quad (1.11)$$

($H_{2,3}^{2,1}[\cdot]$ – это частный случай H –функций Фокса). Соответствующие мас-

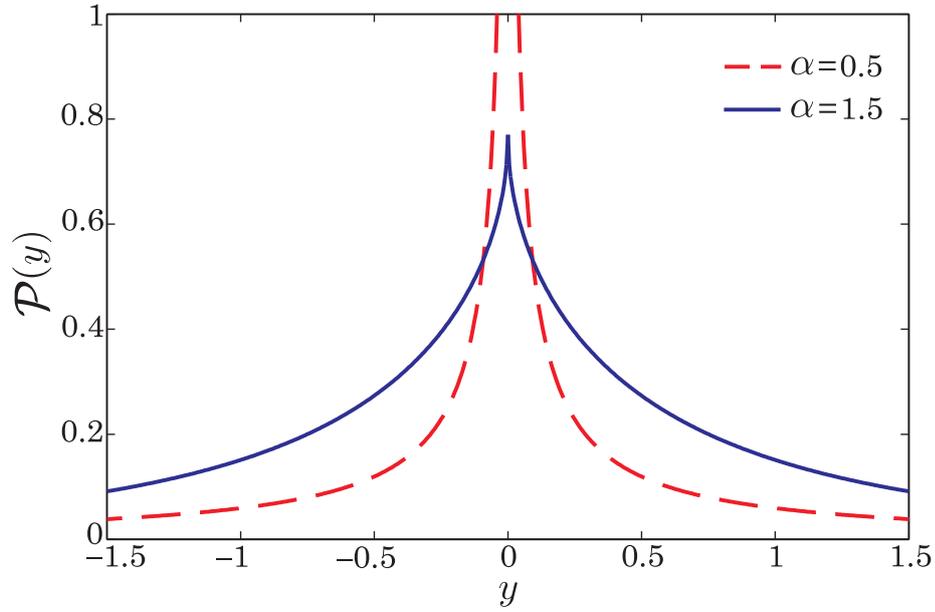


Рисунок 1.1 — Предельная плотность вероятности (1.11) для симметрических блужданий при параметрах $\alpha = 1$ и $\alpha = 2$.

штабирующие функции даются выражением

$$a(t) \sim \begin{cases} \left(\frac{\Gamma(1+\alpha) \sin(\pi\alpha/2)}{\pi u} V(t) \right)^{1/\alpha}, & 0 < \alpha < 2 \\ \sqrt{\frac{2V(t)}{u \ln[1/V(t)]}}, & \alpha = 2 \end{cases} \quad (1.12)$$

при $t \rightarrow \infty$. Здесь $\Gamma(1 + \alpha)$ — гамма функция. Отметим, что уравнение (1.11) при $\alpha = 2$ сводится к (1.8) с $l_1 = 0$. Однако, так как в последнем случае $l_2 = \infty$, то масштабирующая функция в формуле (1.12) отличается от данной в уравнении (1.9). Также заметим, что если $p(\tau)$ имеет сверхтяжёлые хвосты, то $V(t)$ — медленно меняющаяся функция [27]. Поэтому, в соответствии с выражениями (1.9) и (1.12), плотность вероятности $P(x, t)$ будет тоже очень медленно изменяться со временем.

Характерное поведение плотностей вероятности, определяемых формулами (1.11), показано на рисунке 1.1.

В данной работе мы продолжаем предыдущие исследования и изучим поведение при больших временах СТРУ со сверхтяжёлыми хвостами времени ожидания (1.7) и асимметрическими тяжёлыми плотностями вероятности величины скачка. Отметим, что распределения $w(\xi)$ могут иметь один или два тяжёлых хвоста. Впрочем, предельная плотность вероятности $\mathcal{P}(y)$ будет зависеть только от наименее убывающего хвоста $w(\xi)$ (см. ниже), а

поэтому, не теряя общности, мы полагаем оба хвоста $w(\xi)$ тяжёлыми

$$w(\xi) \sim \frac{u_{\pm}}{|\xi|^{1+\alpha_{\pm}}} \quad (\xi \rightarrow \pm\infty) \quad (1.13)$$

Здесь $u_{\pm} > 0$ и $\alpha_{\pm} \in (0, 2]$.

В отличие от статьи [29], сейчас мы сконцентрируем внимание на изучении влияния несимметричности распределения длины скачков и покажем, что этот факт существенно сказывается на предельном распределении масштабированного положения частицы. Вдобавок, мы собираемся провести численное моделирование СТРУ, чтобы проверить предсказательные возможности теоретически полученных результатов.

1.2 Предельная плотность вероятности и соответствующие масштабированные функции

1.2.1 Представление $\mathcal{P}(\mathbf{y})$ в виде обратного преобразования Фурье

Исходным пунктом для получения асимптотического поведения плотности вероятности $P(x, t)$ при больших временах является формула (1.3). Далее, мы используем таубернову теорему Караматы для преобразования Лапласа [34], которая гласит, что если функция $v(t)$ начиная с некоторого момента будет монотонной и $v_s \sim s^{-\gamma}L(1/s)$ ($0 < \gamma < \infty$) при $s \rightarrow 0$, тогда $v(t) \sim t^{\gamma-1}L(t)/\Gamma(\gamma)$ при $t \rightarrow \infty$, где $L(t)$ медленно меняется на бесконечности. Таким образом, поведение $P(x, t)$ при $t \rightarrow \infty$ будет задаваться поведением $P_s(x)$ при $s \rightarrow 0$. Следовательно, исходя из формулы (1.3), нам необходимо для начала найти асимптотику p_s при малых значениях s . Используя формулу

$$\begin{aligned} 1 - p_s &= \int_0^{\infty} dt (1 - e^{-st}) p(t) \\ &= \int_0^{\infty} dq e^{-q} V(q/s) \end{aligned} \quad (1.14)$$

и принимая во внимание, что

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{V(\mu t)}{V(t)} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\int_{\mu t}^{\infty} d\tau p(\tau)}{\int_t^{\infty} d\tau p(\tau)} = 1, \quad (1.15)$$

(т. е. $V(t)$ является медленно меняющейся на бесконечности), имеем

$$1 - p_s \sim V(1/s) \quad (1.16)$$

при $s \rightarrow 0$. А поэтому уравнение (1.3) даёт

$$\begin{aligned} P_s(x) \sim & \frac{V(1/s)}{s} \delta(x) + \frac{V(1/s)[1 - V(1/s)]}{2\pi s} \\ & \times \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{e^{-ikx}}{V(1/s) + 1 - w_k}. \end{aligned} \quad (1.17)$$

Применяя к $P_s(x)$ сформулированную выше таубероу теорему, из выражения (1.17) следует

$$\begin{aligned} P(x, t) \sim & V(t)\delta(x) + \frac{V(t)[1 - V(t)]}{2\pi} \\ & \times \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{e^{-ikx}}{V(t) + 1 - w_k} \end{aligned} \quad (1.18)$$

($t \rightarrow \infty$). С помощью этого результата мы можем представить предельную плотность вероятности (1.6) в виде обратного преобразования Фурье

$$\mathcal{P}(y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{e^{-iky}}{1 + \Phi(\kappa)}, \quad (1.19)$$

где

$$\Phi(\kappa) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1 - w_{\kappa a(t)}}{V(t)}. \quad (1.20)$$

Отметим, что так как $\int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-iky} = 2\pi\delta(\kappa)$ и $\Phi(0) = 0$, то легко видеть, что эта плотность вероятности нормирована ($\int_{-\infty}^{+\infty} dy \mathcal{P}(y) = 1$). Однако, факт неотрицательности $\mathcal{P}(y)$ из формулы (1.19) не виден и будет показан далее. Также ниже мы проведём детальное аналитическое исследование, что-

бы получить более удобные формы представления $\mathcal{P}(y)$ и соответствующие функции $a(t)$ во всех интересующих нас случаях, и покажем, что $\mathcal{P}(y)$ удовлетворяет простое дробное (по пространственной координате) уравнение.

1.2.2 Распределения длины скачка с $l_1 \neq 0$

Если первый момент l_1 плотности вероятности величины скачков существует и не равен нулю, тогда из соотношения $1 - w_k = \int_{-\infty}^{\infty} dx(1 - e^{ikx})w(x)$ при $k \rightarrow 0$ следует $1 - w_k \sim -il_1k$, и поэтому уравнение (1.20) сводится к виду

$$\Phi(\kappa) = -i\kappa \operatorname{sgn}(l_1) \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{|l_1|a(t)}{V(t)} \quad (1.21)$$

[$\operatorname{sgn}(x) = \pm 1$, если $x \gtrless 0$]. Выбирая следующее асимптотическое поведение масштабирующей функции

$$a(t) \sim \frac{V(t)}{|l_1|} \quad (1.22)$$

($t \rightarrow \infty$) уравнение (1.21) даёт $\Phi(\kappa) = -i\kappa \operatorname{sgn}(l_1)$. Значит из (1.19) мы получаем одностороннее экспоненциальное распределение

$$\mathcal{P}(y) = e^{-|y|} H(l_1 y). \quad (1.23)$$

Эта плотность вероятности описывает СТРУ-процесс, который характеризуются сверхтяжёлыми распределениями времени ожидания и тяжёлыми распределениями величины скачка с конечным ненулевым моментом первого порядка. Следовательно, формулы (1.22) и (1.23), в частности, характеризуют СТРУ с конечным моментом второго порядка для $w(\xi)$ [см. уравнение (1.8)] или с тяжёлыми хвостами $w(\xi)$ при $\alpha_{\pm} \in (1, 2]$.

1.2.3 Распределения длины скачка с $\alpha \in (1, 2)$ и $l_1 = 0$

Если момент первого порядка $w(\xi)$ равен нулю, тогда для нахождения асимптотического поведения $1 - w_k$ при $k \rightarrow 0$ используем следующую формулу:

$$1 - w_k = \frac{1}{|k|} \int_0^\infty dx (1 - \cos x) w^+ \left(\frac{x}{|k|} \right) + \frac{i}{k} \int_0^\infty dx (x - \sin x) w^- \left(\frac{x}{|k|} \right), \quad (1.24)$$

где

$$w^\pm(\xi) = w(\xi) \pm w(-\xi). \quad (1.25)$$

Введём обозначение

$$\alpha = \min\{\alpha_+, \alpha_-\} \quad (1.26)$$

и сосредоточимся пока что на случае $\alpha \in (1, 2)$. Тогда, используя стандартные интегралы [35]

$$\int_0^\infty dx \frac{1 - \cos x}{x^{1+\nu}} = \frac{\pi}{2\Gamma(1 + \nu) \sin(\pi\nu/2)} \quad (1.27)$$

($0 < \nu < 2$) и

$$\int_0^\infty dx \frac{x - \sin x}{x^{1+\nu}} = -\frac{\pi}{2\Gamma(1 + \nu) \cos(\pi\nu/2)} \quad (1.28)$$

($1 < \nu < 2$), можно показать, что из уравнения (1.24) следует

$$1 - w_k \sim q|k|^\alpha - i \operatorname{sgn}(k)r|k|^\alpha \quad (1.29)$$

($k \rightarrow 0$), где

$$q = \frac{\pi}{2\Gamma(1 + \alpha) \sin(\pi\alpha/2)} (u_+ \delta_{\alpha\alpha_+} + u_- \delta_{\alpha\alpha_-}) \quad (1.30)$$

и

$$r = \frac{\pi}{2\Gamma(1 + \alpha) \cos(\pi\alpha/2)} (u_+ \delta_{\alpha\alpha_+} - u_- \delta_{\alpha\alpha_-}). \quad (1.31)$$

Стоит отметить, что выражения (1.29)–(1.31) справедливы также и для случая $\alpha_{\max} = \max\{\alpha_+, \alpha_-\}$, т. е. для $\alpha_{\max} \in [\alpha, 2]$.

Пусть $a(t)$ имеет следующее асимптотическое поведение

$$a(t) \sim \left(\frac{V(t)}{\sqrt{q^2 + r^2}} \right)^{1/\alpha} \quad (1.32)$$

($t \rightarrow \infty$), тогда из соотношений (1.20) и (1.29) получаем

$$\Phi(\kappa) = (\cos \varphi - i \operatorname{sgn}(\kappa) \sin \varphi) |\kappa|^\alpha, \quad (1.33)$$

и предельная плотность (1.19) представляется в форме

$$\mathcal{P}(y) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\kappa \frac{(1 + \cos \varphi \kappa^\alpha) \cos(y\kappa) + \sin \varphi \kappa^\alpha \sin(y\kappa)}{1 + 2 \cos \varphi \kappa^\alpha + \kappa^{2\alpha}}. \quad (1.34)$$

Здесь

$$\cos \varphi = \frac{q}{\sqrt{q^2 + r^2}}, \quad \sin \varphi = \frac{r}{\sqrt{q^2 + r^2}} \quad (1.35)$$

и

$$\begin{aligned} \sqrt{q^2 + r^2} &= \frac{\pi}{2\Gamma(1 + \alpha) \sin(\pi\alpha/2) |\cos(\pi\alpha/2)|} \\ &\times (2 \cos(\pi\alpha) u_+ u_- \delta_{\alpha\alpha_+} \delta_{\alpha\alpha_-} \\ &+ u_+^2 \delta_{\alpha\alpha_+} + u_-^2 \delta_{\alpha\alpha_-})^{1/2}. \end{aligned} \quad (1.36)$$

Предельная плотность вероятности (1.34) и соответствующая ей масштабированная функция (1.32) описывают как симметрические, так и несимметрические СТРУ. В частности, если $\alpha_+ = \alpha_- = \alpha \in (1, 2)$ и $u_+ = u_- =$

u , то $\varphi = 0$,

$$\sqrt{q^2 + r^2} = \frac{\pi u}{\Gamma(1 + \alpha) \sin(\pi\alpha/2)}, \quad (1.37)$$

и уравнения (1.34) и (1.32) сводятся к (1.11) и (1.12).

1.2.4 Распределения длины скачка с $\alpha \in (0, 1)$

Поскольку при $\alpha \in (0, 1)$ момент первого порядка плотности $w(\xi)$ не существует, то в этом случае удобно вместо (1.24) использовать выражение:

$$1 - w_k = \frac{1}{|k|} \int_0^\infty dx (1 - \cos x) w_+ \left(\frac{x}{|k|} \right) - \frac{i}{k} \int_0^\infty dx \sin x w_- \left(\frac{x}{|k|} \right). \quad (1.38)$$

На первый взгляд кажется, что при $\alpha_{\max} \in [\alpha, 1)$ и $\alpha_{\max} \in [1, 2]$ имеют место две разные ситуации. Однако, так как нас интересует главный член разложения $1 - w_k$ при $k \rightarrow 0$, мы можем ограничить себя рассмотрением (1.38) только при $\alpha_{\max} \in [\alpha, 1)$. Тогда, используя асимптотическую формулу (1.13), стандартный интеграл (1.27) и

$$\int_0^\infty dx \frac{\sin x}{x^{1+\nu}} = \frac{\pi}{2\Gamma(1 + \nu) \cos(\pi\nu/2)} \quad (1.39)$$

($0 < \nu < 1$), можно показать, что уравнение (1.38) при $k \rightarrow 0$ соответствует (1.29) с параметрами q и r , которые даются формулами (1.30) и (1.31). Так как эти результаты имеют место также и для $\alpha_{\max} \in [1, 2]$, то следует вывод, что выражения (1.32) и (1.34) для функции $a(t)$ и плотности $\mathcal{P}(y)$ справедливы не только при $\alpha \in (1, 2)$, но и при $\alpha \in (0, 1)$. Отметим, что из формул (1.32) и (1.34) при $\alpha_+ = \alpha_- = \alpha \in (0, 1)$ и $u_+ = u_- = u$ получаются выражения (1.12) и (1.11).

1.2.5 Распределения длины скачка с $\alpha = 1$

Обозначим первый и второй член в правой части уравнения (1.38) соответственно через J_1 и J_2 , тогда для $\alpha = 1$ при $k \rightarrow 0$ получим

$$J_1 \sim \frac{\pi}{2}(u_+\delta_{1\alpha_+} + u_-\delta_{1\alpha_-})|k| \quad (1.40)$$

и

$$\begin{aligned} J_2 &\sim ik \int_{c|k|}^{\infty} dx \frac{\sin x}{x^2} (u_+\delta_{1\alpha_+} - u_-\delta_{1\alpha_-}) \\ &\sim i(u_+\delta_{1\alpha_+} - u_-\delta_{1\alpha_-})k \ln \frac{1}{|k|}, \end{aligned} \quad (1.41)$$

где константа $c > 0$. Если параметр

$$\rho = u_+\delta_{1\alpha_+} - u_-\delta_{1\alpha_-} \quad (1.42)$$

не равен нулю, то $J_1 = o(J_2)$, а следовательно

$$1 - w_k \sim -i\rho k \ln \frac{1}{|k|} \quad (1.43)$$

($k \rightarrow 0$) и

$$\begin{aligned} \Phi(\kappa) &= -i\rho\kappa \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{a(t)}{V(t)} \ln \frac{1}{|\kappa|a(t)} \\ &= -i\rho\kappa \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{a(t)}{V(t)} \ln \frac{1}{a(t)}. \end{aligned} \quad (1.44)$$

Пусть при больших значениях времени

$$\frac{|\rho|a(t)}{V(t)} \ln \frac{1}{a(t)} \sim 1, \quad (1.45)$$

тогда можно показать, что

$$a(t) \sim \frac{V(t)}{|\rho| \ln[1/V(t)]} \quad (1.46)$$

при $t \rightarrow \infty$, а значит $\Phi(\kappa) = -i\kappa \operatorname{sgn}(\rho)$ и

$$\mathcal{P}(y) = e^{-|y|} H(\rho y). \quad (1.47)$$

Сравнение формул (1.47) и (1.23) показывает, что $\mathcal{P}(y)$ при $\alpha = 1$ и $\rho \neq 0$ имеет такую же форму, как и в случае $\alpha \in (1, 2)$ ($l_1 \neq 0$), только роль момента первого порядка $w(\xi)$ (который равен бесконечности при $\alpha = 1$) будет играть параметр ρ . Однако, это только частичная аналогия, так как в этих ситуациях будут различные масштабирующие функции (1.22) и (1.46).

В противном случае, если $\rho = 0$ (это может быть только когда $\alpha_+ = \alpha_- = 1$ и $u_+ = u_- = u$), $J_2 = 0$ и вклад делает только член J_1 , т.е.

$$1 - w_k \sim \pi u |k| \quad (1.48)$$

($k \rightarrow 0$) и

$$\Phi(\kappa) = \pi u \kappa \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{a(t)}{V(t)}. \quad (1.49)$$

Выбирая поведение масштабирующей функции в виде

$$a(t) \sim \frac{V(t)}{\pi u}, \quad (1.50)$$

из (1.19) с $\Phi(\kappa) = |\kappa|$ мы получаем

$$\mathcal{P}(y) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\kappa \frac{\cos(y\kappa)}{1 + \kappa}. \quad (1.51)$$

Этот результат является частным случаем формулы (1.11) с той же масштабирующей функцией, что и в уравнении (1.12) при $\alpha = 1$.

1.2.6 Распределения длины скачка с $\alpha = 2$

Поскольку $\alpha_\pm \leq 2$, то из условия $\alpha = 2$ находим $\alpha_+ = \alpha_- = 2$. Очевидно, что если $l_1 \neq 0$, то предельная плотность вероятности даётся

формулой (1.23) с соответствующей ей масштабирующей функцией (1.22). Однако, при $l_1 = 0$ из (1.24) и (1.20) получаем

$$\begin{aligned} 1 - w_k &\sim (u_+ + u_-)k^2 \int_{c|k|}^{\infty} dx \frac{1 - \cos x}{x^3} \\ &\sim \frac{1}{2}(u_+ + u_-)k^2 \ln \frac{1}{|k|} \end{aligned} \quad (1.52)$$

($k \rightarrow 0$, константа $0 < c < \infty$) и поэтому

$$\Phi(\kappa) = \frac{1}{2}(u_+ + u_-)\kappa^2 \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{a^2(t)}{V(t)} \ln \frac{1}{a(t)}. \quad (1.53)$$

При следующем поведении масштабирующей функции

$$a(t) \sim 2\sqrt{\frac{V(t)}{(u_+ + u_-) \ln[1/V(t)]}} \quad (1.54)$$

($t \rightarrow \infty$) функция $\Phi(\kappa) = \kappa^2$ и из (1.19) имеем

$$\mathcal{P}(y) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\kappa \frac{\cos(y\kappa)}{1 + \kappa^2} = \frac{1}{2} e^{-|y|}. \quad (1.55)$$

Этот результат при $u_+ = u_-$ совпадает с решением (1.11) и (1.12) в симметрическом случае для $\alpha = 2$. Тем не менее, поскольку условие $l_1 = 0$ не влечёт за собой $w(-\xi) = w(\xi)$, то двухсторонняя экспоненциальная плотность (1.55) соответствует более широкому классу плотностей величины скачка с $\alpha = 2$ и $l_1 = 0$. Отметим также, что предельная плотность вероятности (1.55), как и (1.51), может быть получена из общего представления (1.34) при выполнении предельного перехода $\alpha \rightarrow 2$ и $\alpha \rightarrow 1$. Однако, так как (1.54) и (1.46) не следуют из (1.32), то мы описали эти случаи отдельно.

Таким образом, подводя итоги описанным выше результатам, STRW со сверхтяжёлыми хвостами плотности вероятности времени ожидания характеризуются двумя различными ситуациями.

В первом случае мы имеем одностороннее экспоненциальное распределение (1.23), соответствующее плотностям величины скачка с конечным

ненулевым моментом первого порядка. К тому же, эти же предельные плотности возникают и при $\alpha = 1$ с $\rho = u_+ \delta_{1\alpha_+} - u_- \delta_{1\alpha_-} \neq 0$. Сюда же мы относим и двустороннее экспоненциальное распределение (1.55) при $\alpha = 2$ и $l_1 = 0$. Важной особенностью этого случая есть то, что положение $Y(t)$ имеет конечную дисперсию, а значит мы имеем дело с диффузионным процессом (см. раздел 1.6).

Во втором случае предельная плотность даётся выражением (1.34) и описывает СТРУ при тяжёлых хвостах величины скачка с $\alpha \in (1, 2)$ и $l_1 = 0$, и $\alpha \in (0, 1)$. Также ко второму случаю можно свести предельную плотность (1.51) при $\alpha = 1$ с $\rho = 0$, если в (1.34) положить $\alpha = 1$ и $\varphi = 0$. Характерной особенностью этих плотностей является то, что они будут иметь тяжёлые хвосты (см. раздел 1.4), т. е. дисперсия $Y(t)$ будет всегда бесконечной и имеет место процесс переноса, но не диффузия.

В завершение этого раздела добавим, что в силу осциллирующего характера подынтегральной функции в (1.34) использование $\mathcal{P}(y)$ в этом виде не удобно. Поэтому, чтобы лучше изучить аналитические свойства предельной плотности вероятности, далее мы найдем более предпочтительные формы её представления.

1.3 Альтернативные представления $\mathcal{P}(y)$

1.3.1 Плотность вероятности $\mathcal{P}(y)$ в терминах обратного преобразования Меллина

Для нахождения альтернативного представления предельной плотности вероятности мы для начала перепишем $\mathcal{P}(y)$ формулу (1.34) в виде

$$\mathcal{P}(y) = \mathcal{P}_1(y) + \operatorname{sgn}(y)\mathcal{P}_2(y), \quad (1.56)$$

где

$$\mathcal{P}_1(y) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\kappa \frac{(1 + \cos \varphi \kappa^\alpha) \cos(y\kappa)}{1 + 2 \cos \varphi \kappa^\alpha + \kappa^{2\alpha}} \quad (1.57)$$

и

$$\mathcal{P}_2(y) = \frac{\sin \varphi}{\pi} \int_0^\infty d\kappa \frac{\kappa^\alpha \sin(|y|\kappa)}{1 + 2 \cos \varphi \kappa^\alpha + \kappa^{2\alpha}} \quad (1.58)$$

Применим к функциям $\mathcal{P}^\pm(y) = \mathcal{P}_1(y) \pm \mathcal{P}_2(y)$ [где $\mathcal{P}(y)|_{y \geq 0} = \mathcal{P}^\pm(y)$] преобразование Меллина, которое для функции $f(y)$ определяется следующим образом: $f_r = \mathcal{M}\{f(y)\} = \int_0^\infty dy f(y) y^{r-1}$, при этом для $f(y) = \int_0^\infty dx u(yx)v(x)$ справедливо выражение $f_r = u_r v_{1-r}$ (смотрите, например, [36]). Исходя из этого получаем

$$\mathcal{P}_r^\pm = \mathcal{M}\{\cos y\} F_{1-r} \pm \mathcal{M}\{\sin y\} G_{1-r}. \quad (1.59)$$

Здесь, согласно книге [37], $\mathcal{M}\{\cos y\} = \Gamma(r) \cos(\pi r/2)$ ($0 < \operatorname{Re} r < 1$), $\mathcal{M}\{\sin y\} = \Gamma(r) \sin(\pi r/2)$ ($-1 < \operatorname{Re} r < 1$), а также

$$\begin{aligned} F_{1-r} &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dy \frac{1 + \cos \varphi y^\alpha}{1 + 2 \cos \varphi y^\alpha + y^{2\alpha}} y^{-r} \\ &= \frac{1}{\pi \alpha} \int_0^\infty dy \frac{1 + \cos \varphi y}{1 + 2 \cos \varphi y + y^2} y^{\frac{1-r}{\alpha}-1} \\ &= \frac{\cos[\varphi(1-r)/\alpha]}{\alpha \sin[\pi(1-r)/\alpha]} \end{aligned} \quad (1.60)$$

($1 - \alpha < \operatorname{Re} r < 1$), и

$$\begin{aligned} G_{1-r} &= \frac{\sin \varphi}{\pi} \int_0^\infty dy \frac{y^{\alpha-r}}{1 + 2 \cos \varphi y^\alpha + y^{2\alpha}} \\ &= \frac{\sin \varphi}{\pi \alpha} \int_0^\infty dy \frac{y^{\frac{1-r}{\alpha}}}{1 + 2 \cos \varphi y + y^2} \\ &= \frac{\sin[\varphi(1-r)/\alpha]}{\alpha \sin[\pi(1-r)/\alpha]} \end{aligned} \quad (1.61)$$

($1 - \alpha < \operatorname{Re} r < 1 + \alpha$).

Таким образом, из соотношения (1.59) находим

$$\mathcal{P}_r^\pm = \frac{\Gamma(r) \sin[(\pi\alpha/2 \pm \varphi)(1-r)/\alpha]}{\alpha \sin[\pi(1-r)/\alpha]} \quad (1.62)$$

с $\max(1 - \alpha, 0) < \operatorname{Re} r < 1$. Используя определение обратного преобразования Меллина: $\mathcal{M}^{-1}\{f_r\} = f(y) = (2\pi i)^{-1} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} dr f_r y^{-r}$ и учитывая соотношения $\mathcal{P}(y)|_{y \geq 0} = \mathcal{P}^{\pm}(y)$ и (1.62), мы можем представить предельную плотность вероятности (1.34) в терминах обратного преобразования Меллина

$$\mathcal{P}(y) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} dr \frac{\Gamma(r) \sin\left[\phi(y) \frac{1-r}{\alpha}\right]}{\alpha \sin\left(\pi \frac{1-r}{\alpha}\right)} |y|^{-r}, \quad (1.63)$$

где $\max(1 - \alpha, 0) < c < 1$ и

$$\phi(y) = \frac{\pi\alpha}{2} + \operatorname{sgn}(y)\varphi. \quad (1.64)$$

Важно подчеркнуть, что представления (1.34) и (1.63) справедливы при всех значениях хвостового индекса α из интервала $(0, 2]$. Но поскольку предельная плотность вероятности при $\alpha = 1$ и $\alpha = 2$ (см. подразделы 1.2.5 и 1.2.6) имеют простую форму, то далее мы сосредоточим внимание на выражении (1.63) только для $\alpha \in (0, 1)$ и $\alpha \in (1, 2)$. Возможны четыре различных ситуации для интересующих нас значений хвостового параметра, каждую из которых мы по отдельности опишем ниже.

$$\alpha \in (0, 1), \alpha_+ \neq \alpha_-.$$

В этом случае из уравнений (1.35), (1.30), (1.31) и (1.36) следует $\cos \varphi = \cos(\pi\alpha/2)$ и $\sin \varphi = (\delta_{\alpha\alpha_+} - \delta_{\alpha\alpha_-}) \sin(\pi\alpha/2)$. Из двух последних равенств получаем $\varphi = (\delta_{\alpha\alpha_+} - \delta_{\alpha\alpha_-})\pi\alpha/2$, и поэтому уравнение (1.64) даёт следующий результат

$$\phi(y) = [1 + \operatorname{sgn}(\sigma y)] \frac{\pi\alpha}{2}, \quad (1.65)$$

где $\sigma = \delta_{\alpha\alpha_+} - \delta_{\alpha\alpha_-} = \operatorname{sgn}(\alpha_- - \alpha_+)$. Вводя обозначение $\phi_{\operatorname{sgn}(\sigma y)} = \phi(y)$, из (1.65) получаем $\phi_+ = \pi\alpha$ и $\phi_- = 0$. На основании последнего равенства делаем вывод, что $\mathcal{P}(y) = 0$ при $\sigma y < 0$, иными словами в случае $\alpha \in (0, 1)$ и $\alpha_+ \neq \alpha_-$ плотность $\mathcal{P}(y)$ будет односторонней. В соответствии с (1.63)

можем получить

$$\mathcal{P}(y) = \frac{H(\sigma y)}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} dr \frac{\Gamma(r) \sin\left(\phi_+ \frac{1-r}{\alpha}\right)}{\alpha \sin\left(\pi \frac{1-r}{\alpha}\right)} |y|^{-r} \quad (1.66)$$

с $\phi_+ = \pi\alpha$.

$$\alpha \in (1, 2), \alpha_+ \neq \alpha_-, l_1 = 0.$$

В этих условиях выражение (1.35) приводит к системе уравнений $\cos \varphi = -\cos(\pi\alpha/2)$ и $\sin \varphi = -\sigma \sin(\pi\alpha/2)$, решение которой даётся выражением $\varphi = -\sigma(\pi - \pi\alpha/2)$. Следовательно, из (1.65) имеем

$$\phi(y) = \frac{\pi\alpha}{2} - \operatorname{sgn}(\sigma y) \left(\pi - \frac{\pi\alpha}{2} \right), \quad (1.67)$$

а значит $\phi_+ = \pi(\alpha - 1)$ и $\phi_- = \pi$. Таким образом, используя обратное преобразование Меллина для гамма-функции [37]

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} dr \Gamma(r) |y|^{-r} = e^{-|y|} \quad (1.68)$$

($c > 0$), уравнение (1.63) может быть записано в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(y) = & \frac{H(\sigma y)}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} dr \frac{\Gamma(r) \sin\left(\phi_+ \frac{1-r}{\alpha}\right)}{\alpha \sin\left(\pi \frac{1-r}{\alpha}\right)} |y|^{-r} \\ & + H(-\sigma y) \frac{1}{\alpha} e^{-|y|}, \end{aligned} \quad (1.69)$$

где $\phi_+ = \pi(\alpha - 1)$.

Исходя из этого можно сделать вывод, что если $\alpha \in (1, 2)$ и $\alpha_+ \neq \alpha_-$, то, в отличие от предыдущего случая, предельная плотность вероятности будет двусторонней. Как видно из (1.69), эта плотность будет экспоненциальной при $y > 0$ и $\alpha = \alpha_-$ или при $y < 0$ и $\alpha = \alpha_+$. Также отметим, что при $y = 0$ предполагается выполнение условия $H(y\sigma)|_{y=0} = H(\sigma)$.

$$\alpha_+ = \alpha_- = \alpha \in (0, 1), u_+ \neq u_-.$$

В данном случае уравнения (1.35) дают

$$\begin{aligned}\cos \varphi &= \frac{(u_+ + u_-) \cos(\pi\alpha/2)}{\sqrt{u_+^2 + u_-^2 + 2 \cos(\pi\alpha)u_+u_-}}, \\ \sin \varphi &= \frac{(u_+ - u_-) \sin(\pi\alpha/2)}{\sqrt{u_+^2 + u_-^2 + 2 \cos(\pi\alpha)u_+u_-}}.\end{aligned}\tag{1.70}$$

Вводя обозначение

$$\epsilon = \frac{u_+ - u_-}{u_+ + u_-},\tag{1.71}$$

из формулы (1.70) вытекает

$$\varphi = \operatorname{sgn}(\epsilon) \arctan \left[|\epsilon| \tan \left(\frac{\pi\alpha}{2} \right) \right],\tag{1.72}$$

где $\arctan(\cdot)$ обозначает главное значение обратной к тангенсу функции. И, наконец, представляя двузначную функцию (1.64) как $\phi(y) = \phi_{\operatorname{sgn}(\epsilon y)}$, где

$$\phi_{\pm} = \frac{\pi\alpha}{2} \pm \arctan \left[|\epsilon| \tan \left(\frac{\pi\alpha}{2} \right) \right],\tag{1.73}$$

и используя уравнение (1.63), мы находим двустороннее представление предельной плотности вероятности

$$\begin{aligned}\mathcal{P}(y) &= \frac{H(\epsilon y)}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} dr \frac{\Gamma(r) \sin(\phi_+ \frac{1-r}{\alpha})}{\alpha \sin(\pi \frac{1-r}{\alpha})} |y|^{-r} \\ &+ \frac{H(-\epsilon y)}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} dr \frac{\Gamma(r) \sin(\phi_- \frac{1-r}{\alpha})}{\alpha \sin(\pi \frac{1-r}{\alpha})} |y|^{-r}.\end{aligned}\tag{1.74}$$

Так как $\alpha \in (0, 1)$ и $|\epsilon| < 1$, то легко проверить, что $\arctan[|\epsilon| \tan(\pi\alpha/2)] \in (0, \pi\alpha/2)$, а поэтому $\pi\alpha/2 < \phi_+ < \pi\alpha$, $0 < \phi_- < \pi\alpha/2$, и $\phi_+ > \phi_-$.

$$\alpha_+ = \alpha_- = \alpha \in (1, 2), \quad u_+ \neq u_-, \quad l_1 = 0.$$

И, наконец, в последнем случае $\mathcal{P}(y)$ даётся той же формулой (1.74), что и в предыдущем. Для нахождения параметров ϕ_+ и ϕ_- мы зададим

уравнения

$$\begin{aligned}\cos \varphi &= -\frac{(u_+ + u_-) \cos(\pi\alpha/2)}{\sqrt{u_+^2 + u_-^2 + 2 \cos(\pi\alpha)u_+u_-}}, \\ \sin \varphi &= -\frac{(u_+ - u_-) \sin(\pi\alpha/2)}{\sqrt{u_+^2 + u_-^2 + 2 \cos(\pi\alpha)u_+u_-}},\end{aligned}\tag{1.75}$$

которые следуют из (1.35). Так как решение этих уравнений имеют такой же вид как и (1.72), то параметры ϕ_+ и ϕ_- тоже могут быть определены из (1.73). Тем не менее, исходя из того, что $\arctan[|\epsilon| \tan(\pi\alpha/2)] \in (\pi\alpha/2 - \pi, 0)$, в отличие от предыдущего случая, мы имеем $\pi(\alpha - 1) < \phi_+ < \pi\alpha/2$, $\pi\alpha/2 < \phi_- < \pi$, и $\phi_+ < \phi_-$.

1.3.2 Плотность вероятности $\mathcal{P}(\mathbf{y})$ в терминах преобразования Лапласа

Для нахождения предельной плотности вероятности в терминах преобразования Лапласа в уравнении (1.63) мы сделаем замену переменной интегрирования $\eta = (1 - r)/\alpha$ и используем интегральное представление гамма-функции $\Gamma(r) = \int_0^\infty dz e^{-z} z^{r-1}$ ($\text{Re } r > 0$) [38]. Отсюда непосредственно следует

$$\begin{aligned}\mathcal{P}(y) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} d\eta \Gamma(1 - \alpha\eta) \frac{\sin[\phi(y)\eta]}{\sin(\pi\eta)} |y|^{\alpha\eta-1} \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_0^\infty dz e^{-z} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} d\eta \frac{\sin[\phi(y)\eta]}{|y| \sin(\pi\eta)} \left(\frac{z^\alpha}{|y|^\alpha} \right)^{-\eta}\end{aligned}\tag{1.76}$$

с параметром $0 < c < \min\{1, 1/\alpha\}$. Далее, используя соотношение [39]

$$\frac{1}{2i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} d\eta \frac{\sin(\vartheta\eta)}{\sin(\pi\eta)} z^{-\eta} = \frac{\sin \vartheta z}{1 + 2 \cos \vartheta z + z^2}\tag{1.77}$$

($-\pi < \vartheta < \pi$) и делая в уравнении (1.76) замену переменной $x = z/|y|$, мы находим искомое представление предельной плотности вероятности

$$\mathcal{P}(y) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} dx e^{-|y|x} \frac{\sin[\phi(y)]x^\alpha}{1 + 2 \cos[\phi(y)]x^\alpha + x^{2\alpha}}. \quad (1.78)$$

Заметим, что хотя выражение (1.77) не пригодно для $\vartheta = \pi$, уравнение (1.78) при $\phi(y) = \pi$ даёт правильный результат, если $\mathcal{P}(y)|_{\phi(y)=\pi}$ интерпретировать как предел $\lim_{\zeta \rightarrow 0} \mathcal{P}(y)|_{\phi(y)=\pi-\zeta}$.

Предельная плотность вероятности $\mathcal{P}(y)$ в виде (1.78) удобна для определения многих интересующих нас свойств. В частности, из этого представления следует, что $\mathcal{P}(y) \geq 0$ (т. е. функция $\mathcal{P}(y)$ действительно будет плотностью вероятности), $d\mathcal{P}(y)/d|y| \leq 0$ ($y \neq 0$), и $\max \mathcal{P}(y) = \mathcal{P}(0)$. Более того, в силу экспоненциального множителя в подынтегральной функции представление (1.78) наиболее предпочтительно для численного нахождения $\mathcal{P}(y)$ при больших значениях $|y|$.

С целью упрощения полученного выражения для $\mathcal{P}(y)$ в виде обратного преобразования Лапласа ниже мы отдельно рассмотрим все четыре возможных случая, которые были установлены в подразделе 1.3.1.

$$\alpha \in (0, 1), \alpha_+ \neq \alpha_-.$$

В соответствии с (1.66) и (1.78) получаем

$$\mathcal{P}(y) = \frac{H(\sigma y)}{\pi} \int_0^{\infty} dx e^{-|y|x} \frac{\sin(\phi_+)x^\alpha}{1 + 2 \cos(\phi_+)x^\alpha + x^{2\alpha}} \quad (1.79)$$

с $\phi_+ = \pi\alpha$. Так как при $y = 0$ этот интеграл расходится, то $\mathcal{P}(y)|_{\sigma y \rightarrow +0} = \infty$. Далее, на основе стандартного интеграла [35]

$$\int_0^{\infty} dz \frac{z^{\nu-1}}{1 + 2 \cos \vartheta z + z^2} = \frac{\pi \sin[\vartheta(1 - \nu)]}{\sin \vartheta \sin(\pi\nu)} \quad (1.80)$$

($0 < |\vartheta| < \pi, 0 < \nu < 2$) и принимая во внимание, что при $\nu = 1$ правая часть уравнения (1.80) равна $\vartheta/\sin \vartheta$, легко убедиться, что условие норми-

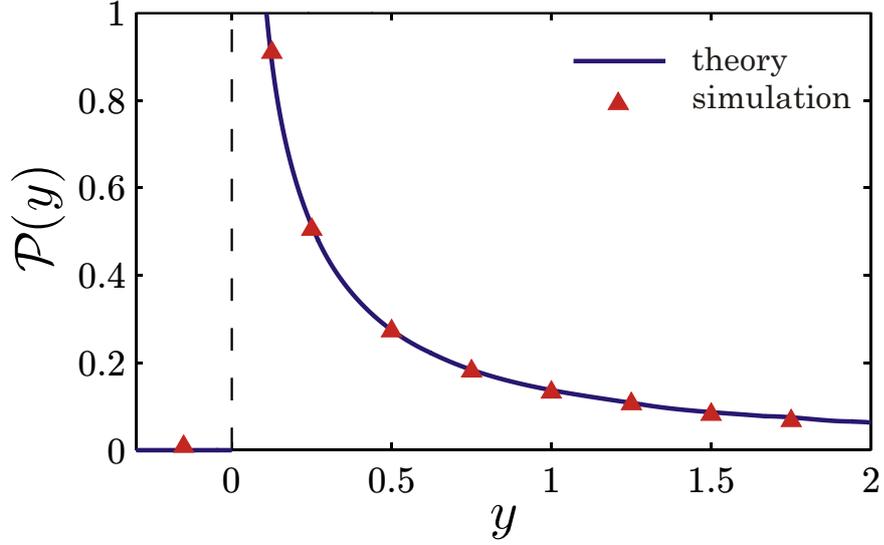


Рисунок 1.2 – Предельная плотность вероятности при $\alpha_+ = \alpha = 1/2$ и $\alpha_- > \alpha_+$. Сплошная линия показывает теоретическое поведение (1.79), а результаты численного моделирования (см. раздел 1.7) показаны треугольниками.

ровки для $\mathcal{P}(y)$ сохраняется:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dy \mathcal{P}(y) &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} dx \frac{\sin(\pi\alpha) x^{\alpha-1}}{1 + 2 \cos(\pi\alpha) x^\alpha + x^{2\alpha}} \\ &= \frac{1}{\pi\alpha} \int_0^{\infty} dz \frac{\sin(\pi\alpha)}{1 + 2 \cos(\pi\alpha) z + z^2} = 1. \end{aligned} \quad (1.81)$$

Главная особенность предельной плотности вероятности в этом случае состоит в её односторонности, а именно: $\mathcal{P}(y) = 0$ при $y > 0$, если $\alpha_+ > \alpha_-$; или при $y < 0$, если $\alpha_- > \alpha_+$. Следовательно, распределение частиц будет сосредоточено на той полуоси, для которой хвостовой индекс наименьший, т. е. вероятность совершить очень длинный скачок выше. Для ясности подчеркнём, что общая вероятность скачка в этом направлении $W_{\text{sgn}(\sigma)} = \int_0^{\infty} d\xi w[\text{sgn}(\sigma)\xi]$ может быть меньше, чем вероятность $W_{-\text{sgn}(\sigma)} = 1 - W_{\text{sgn}(\sigma)}$ скачка в противоположном направлении.

Поведение предельной плотности вероятности при $\alpha \in (0, 1)$ и $\alpha_+ \neq \alpha_-$ представлено на рисунке 1.2.

$$\alpha \in (1, 2), \alpha_+ \neq \alpha_-, l_1 = 0.$$

В данной ситуации предельная плотность вероятности имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(y) = & \frac{H(\sigma y)}{\pi} \int_0^\infty dx e^{-|y|x} \frac{\sin(\phi_+) x^\alpha}{1 + 2 \cos(\phi_+) x^\alpha + x^{2\alpha}} \\ & + H(-\sigma y) \frac{1}{\alpha} e^{-|y|}, \end{aligned} \quad (1.82)$$

где $\phi_+ = \pi(\alpha - 1)$. С помощью уравнения (1.80) можно показать, что $\mathcal{P}(y)$ нормирована и

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(y)|_{\sigma y \rightarrow +0} &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dx \frac{\sin(\phi_+) x^\alpha}{1 + 2 \cos(\phi_+) x^\alpha + x^{2\alpha}} \\ &= \frac{1}{\pi \alpha} \int_0^\infty dz \frac{\sin(\phi_+) z^{1/\alpha}}{1 + 2 \cos(\phi_+) z + z^2} \\ &= \frac{\sin(\phi_+/\alpha)}{\alpha \sin(\pi/\alpha)}. \end{aligned} \quad (1.83)$$

Поскольку $\phi_+ = \pi(\alpha - 1)$, то, с учётом (1.82), имеем

$$\mathcal{P}(0) = \mathcal{P}(y)|_{\sigma y \rightarrow \pm 0} = \frac{1}{\alpha}. \quad (1.84)$$

Таким образом, в отличие от предыдущего случая, предельная плотность вероятности будет двусторонней. При этом одна ветвь $\mathcal{P}(y)$ (левая при $\alpha_- > \alpha_+$ или правая при $\alpha_+ > \alpha_-$) будет чисто экспоненциальной, а вторая имеет тяжёлый хвост (см. раздел 1.4). Отметим, что тяжёлая ветвь $\mathcal{P}(y)$ будет на той полуоси, где хвостовой индекс плотности величины скачка наименьший. Однако, вероятность $\int_0^\infty dy \mathcal{P}[-\text{sgn}(\sigma)y] = 1/\alpha$ того, что $\sigma Y(\infty) < 0$, т. е. вероятность определяемая экспоненциальной ветвью, будет всегда больше $1/2$.

Рисунок 1.3 показывает поведение $\mathcal{P}(y)$ в рассматриваемом случае.

$$\alpha_+ = \alpha_- = \alpha \in (0, 1), \quad u_+ \neq u_-.$$

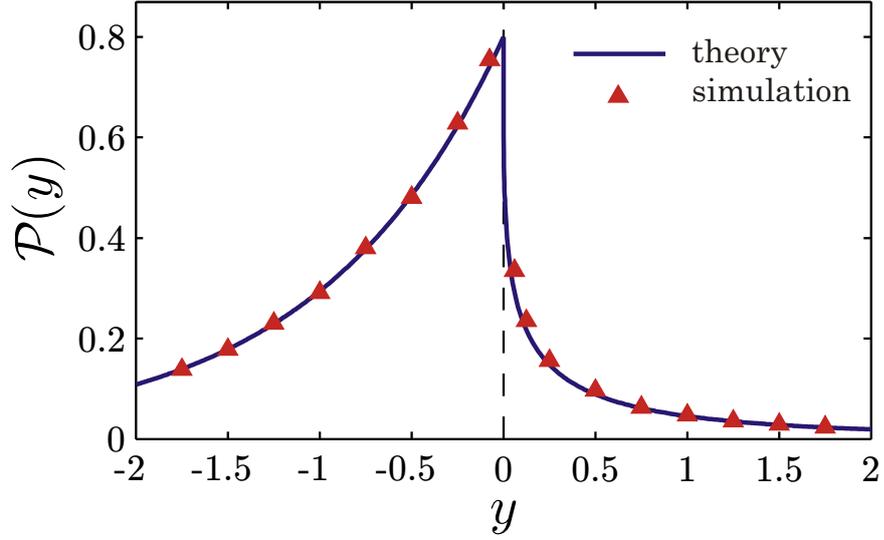


Рисунок 1.3 – Предельная плотность вероятности при $\alpha_+ = \alpha = 5/4$ и $\alpha_- > \alpha_+$. Сплошная линия показывает теоретические результаты, полученные из формулы (1.82), а треугольники соответствуют численным результатам.

Из выражений (1.74) и (1.78) находим

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(y) = & \frac{H(\epsilon y)}{\pi} \int_0^\infty dx e^{-|y|x} \frac{\sin(\phi_+) x^\alpha}{1 + 2 \cos(\phi_+) x^\alpha + x^{2\alpha}} \\ & + \frac{H(-\epsilon y)}{\pi} \int_0^\infty dx e^{-|y|x} \frac{\sin(\phi_-) x^\alpha}{1 + 2 \cos(\phi_-) x^\alpha + x^{2\alpha}}, \end{aligned} \quad (1.85)$$

где параметры ϕ_+ и ϕ_- даются уравнением (1.73). Исходя из того, что $\alpha < 1$, имеем $\mathcal{P}(0) = \infty$, и, вновь используя (1.80), легко проверить нормированность $\mathcal{P}(y)$.

Сравнение с первым случаем показывает, что при $\alpha_+ \neq \alpha_-$ наблюдается сильная асимметрия (одностороннее распределение) плотности вероятности $\mathcal{P}(y)$, в то время как при $u_+ \neq u_-$ (при условии $\alpha_+ = \alpha_-$) распределение будет менее асимметричным двусторонним. Согласно (1.85), в рассматриваемой ситуации обе ветви предельной плотности вероятности будут иметь тяжёлые хвосты с тем же параметром α , что и соответствующая плотность величины скачка (см. также 1.4).

В этом случае поведение $\mathcal{P}(y)$ показано на рисунке 1.4.

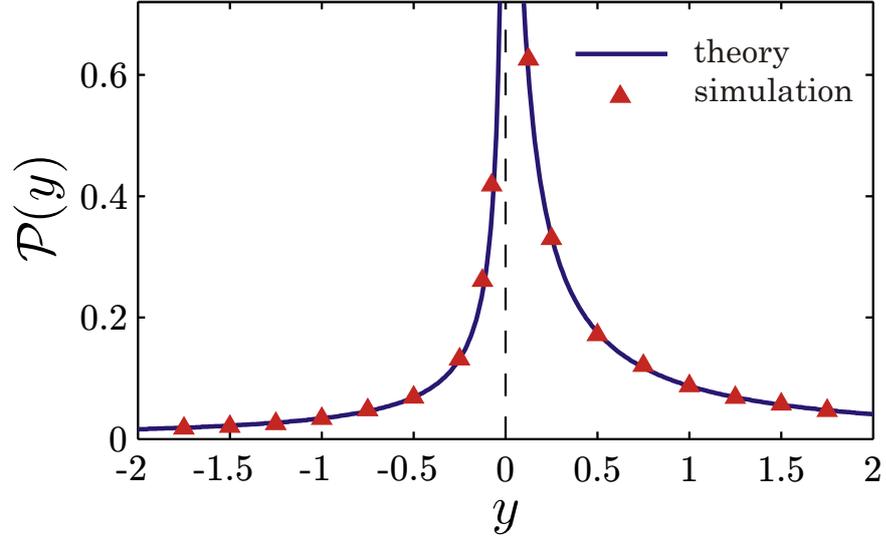


Рисунок 1.4 – Предельная плотность вероятности при $\alpha_+ = \alpha_- = \alpha = 1/2$ и $\epsilon = 1/3$. Сплошная линия и треугольники показывают соответственно теоретические [см. формулу (1.85)] и численные результаты.

$$\alpha_+ = \alpha_- = \alpha \in (1, 2), u_+ \neq u_-, l_1 = 0.$$

Как и в предыдущем случае, предельная плотность вероятности и параметры ϕ_+ и ϕ_- определяются уравнениями (1.85) и (1.73) соответственно. Важным отличием есть то, что в этот раз $\mathcal{P}(0) < \infty$. Чтобы показать чему равно $\mathcal{P}(0)$, мы используем выражение (1.85) и известный интеграл (1.80), отсюда

$$\mathcal{P}(y)|_{\epsilon y \rightarrow \pm 0} = \frac{\sin(\phi_{\pm}/\alpha)}{\alpha \sin(\pi/\alpha)}. \quad (1.86)$$

Основываясь на (1.73), находим $\sin(\phi_+/\alpha) = \sin(\phi_-/\alpha)$, а значит $\mathcal{P}(y)|_{\epsilon y \rightarrow \pm 0} = \mathcal{P}(0)$, где

$$\mathcal{P}(0) = \frac{1}{\alpha \sin(\pi/\alpha)} \cos \left\{ \frac{1}{\alpha} \arctan \left[|\epsilon| \tan \left(\frac{\pi\alpha}{2} \right) \right] \right\}. \quad (1.87)$$

Сравнивая этот случай со вторым, мы снова замечаем, что при неравных значениях параметров α_+ и α_- поведение правой и левой ветвей $\mathcal{P}(y)$ будет сильнее отличаться между собой, чем для различных u_+ и u_- при равенстве хвостовых параметров $\alpha_+ = \alpha_-$.

Поведение $\mathcal{P}(y)$ в этой ситуации показано на рисунке 1.5.

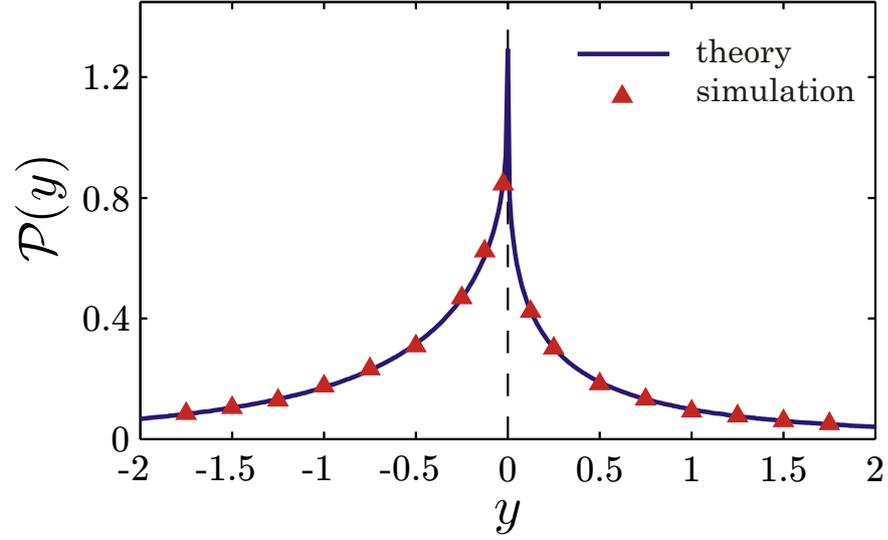


Рисунок 1.5 – Предельная плотность вероятности при $\alpha_+ = \alpha_- = \alpha = 5/4$ и $\epsilon = (\sqrt{2} - 1)/(\sqrt{2} + 1)$. Сплошная линия показывает теоретическую плотность, полученную из формулы (1.85), а треугольники соответствуют результатам численного моделирования.

1.3.3 Представление $\mathcal{P}(y)$ в виде H – функций Фокса

Поскольку H – функции Фокса являются одними из наиболее общих специальных функций, т. е. очень многие элементарные и специальные функции являются их частным случаем, и, к тому же, основные свойства H – функций хорошо изучены, то имеет смысл найти представление предельной плотности вероятности в терминах этих функции. С этой целью мы используем формулу Эйлера [38] $\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \pi/\sin(\pi z)$ и получим

$$\frac{\sin\left[\phi(y)\frac{1-r}{\alpha}\right]}{\sin\left(\pi\frac{1-r}{\alpha}\right)} = \frac{\Gamma\left(\frac{1-r}{\alpha}\right)\Gamma\left(1 - \frac{1-r}{\alpha}\right)}{\Gamma\left[\phi(y)\frac{1-r}{\pi\alpha}\right]\Gamma\left[1 - \phi(y)\frac{1-r}{\pi\alpha}\right]}. \quad (1.88)$$

Далее, подставляя это выражение в (1.63), находим

$$\mathcal{P}(y) = \frac{1}{2\pi i\alpha} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} dr \frac{\Gamma(r)\Gamma\left(\frac{1-r}{\alpha}\right)\Gamma\left(1 - \frac{1-r}{\alpha}\right)}{\Gamma\left[\phi(y)\frac{1-r}{\pi\alpha}\right]\Gamma\left[1 - \phi(y)\frac{1-r}{\pi\alpha}\right]} |y|^{-r}. \quad (1.89)$$

С другой стороны, H – функции могут быть определены с помощью ин-

теграла Меллина-Барнса [40]

$$\begin{aligned} H_{p,q}^{m,n} \left[y \middle| \begin{array}{c} (a_p, A_p) \\ (b_q, B_q) \end{array} \right] &= H_{p,q}^{m,n} \left[y \middle| \begin{array}{c} (a_1, A_1), \dots, (a_p, A_p) \\ (b_1, B_1), \dots, (b_q, B_q) \end{array} \right] \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_L dr \Theta_r y^{-r}, \end{aligned} \quad (1.90)$$

где

$$\Theta_r = \frac{\prod_{j=1}^m \Gamma(b_j + B_j r) \prod_{j=1}^n \Gamma(1 - a_j - A_j r)}{\prod_{j=m+1}^q \Gamma(1 - b_j - B_j r) \prod_{j=n+1}^p \Gamma(a_j + A_j r)}, \quad (1.91)$$

m, n, p, q — целые числа, $0 \leq m \leq q$, $0 \leq n \leq p$, a_j и b_j — действительные или комплексные числа, $A_j, B_j > 0$, L — это подходящий контур в комплексном r -плане, который разделяет полюсы гамма-функций $\Gamma(b_j + B_j r)$ от полюсов гамма-функций $\Gamma(1 - a_j - A_j r)$, и пустое произведение полагается равным 1. Следовательно, сравнивая уравнение (1.91) с подынтегральной функцией в выражении (1.89), приходим к выводу, что предельная плотность $\mathcal{P}(y)$ может быть представлена через H -функции следующим образом

$$\mathcal{P}(y) = \frac{1}{\alpha} H_{2,3}^{2,1} \left[|y| \middle| \begin{array}{c} (1 - \frac{1}{\alpha}, \frac{1}{\alpha}), (1 - \frac{\phi(y)}{\pi\alpha}, \frac{\phi(y)}{\pi\alpha}) \\ (0, 1), (1 - \frac{1}{\alpha}, \frac{1}{\alpha}), (1 - \frac{\phi(y)}{\pi\alpha}, \frac{\phi(y)}{\pi\alpha}) \end{array} \right]. \quad (1.92)$$

Используя эту общую формулу, несложно найти соответствующие представления для всех четырёх обсуждаемых выше случаев. Для примера мы сосредоточим внимание на первом из них [который даётся формулой (1.92)], поскольку в этом случае результат может быть существенно упрощен. В самом деле, так как в этом случае $\phi(y) = \phi_{\text{sgn}(\sigma y)}$ с $\phi_+ = \pi\alpha$ и $\phi_- = 0$, из уравнения (1.92) и с учётом формулы [40]

$$\begin{aligned} H_{p,q}^{m,n} \left[y \middle| \begin{array}{c} (a_1, A_1), \dots, (a_{p-1}, A_{p-1}), (b_1, B_1) \\ (b_1, B_1), \dots, (b_q, B_q) \end{array} \right] \\ = H_{p-1,q-1}^{m-1,n} \left[y \middle| \begin{array}{c} (a_1, A_1), \dots, (a_{p-1}, A_{p-1}) \\ (b_2, B_2), \dots, (b_q, B_q) \end{array} \right] \end{aligned} \quad (1.93)$$

($m \geq 1, p > n$) мы находим

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(y) &= \frac{H(\sigma y)}{\alpha} H_{2,3}^{2,1} \left[|y| \left| \begin{array}{l} (1 - \frac{1}{\alpha}, \frac{1}{\alpha}), (0, 1) \\ (0, 1), (1 - \frac{1}{\alpha}, \frac{1}{\alpha}), (0, 1) \end{array} \right. \right] \\ &= \frac{H(\sigma y)}{\alpha} H_{1,2}^{1,1} \left[|y| \left| \begin{array}{l} (1 - \frac{1}{\alpha}, \frac{1}{\alpha}) \\ (1 - \frac{1}{\alpha}, \frac{1}{\alpha}), (0, 1) \end{array} \right. \right]. \end{aligned} \quad (1.94)$$

Используя соотношение

$$H_{p,q}^{m,n} \left[y \left| \begin{array}{l} (a_p, A_p) \\ (b_q, B_q) \end{array} \right. \right] = \frac{\chi}{y^{\lambda\chi}} H_{p,q}^{m,n} \left[y^\chi \left| \begin{array}{l} (a_p + \lambda\chi A_p, \chi A_p) \\ (b_q + \lambda\chi B_q, \chi B_q) \end{array} \right. \right] \quad (1.95)$$

($\chi > 0, -\infty < \lambda < \infty$) с $\chi = \alpha$ и $\lambda = 1/\alpha - 1$, уравнение (1.94) может быть сведено к виду

$$\mathcal{P}(y) = \frac{H(\sigma y)}{|y|^{1-\alpha}} H_{1,2}^{1,1} \left[|y|^\alpha \left| \begin{array}{l} (0, 1) \\ (0, 1), (1 - \alpha, \alpha) \end{array} \right. \right]. \quad (1.96)$$

И, наконец, исходя из того, что последняя H -функция является обобщённой функцией Миттаг-Леффлера $E_{\alpha,\beta}(z)$ [40], а именно

$$H_{1,2}^{1,1} \left[-z \left| \begin{array}{l} (0, 1) \\ (0, 1), (1 - \beta, \alpha) \end{array} \right. \right] = E_{\alpha,\beta}(z) \quad (1.97)$$

($\alpha, \beta > 0$), предельная плотность вероятности в рассматриваемом случае [т. е. при $\alpha \in (0, 1)$ и $\alpha_+ \neq \alpha_-$] упрощается к виду

$$\mathcal{P}(y) = \frac{H(\sigma y)}{|y|^{1-\alpha}} E_{\alpha,\alpha}(-|y|^\alpha). \quad (1.98)$$

Удобство этого результата связано с тем, что функция Миттаг-Леффлера очень хорошо изучена (например, см. [41] и ссылки в ней). В частности, используя представление этой функции в виде ряда $E_{\alpha,\beta}(z) =$

$\sum_{n=0}^{\infty} z^n / \Gamma(\alpha n + \beta)$, получаем

$$\mathcal{P}(y) = \frac{H(\sigma y)}{|y|^{1-\alpha}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n |y|^{\alpha n}}{\Gamma[\alpha(n+1)]}. \quad (1.99)$$

Отметим, что предельная плотность вероятности (1.98) при $\alpha = 1/2$ может быть сведена к очень простой форме. Для этого примем во внимание, что

$$E_{\alpha,\alpha}(-|y|^\alpha) = -|y|^{1-\alpha} \frac{d}{d|y|} E_{\alpha,1}(-|y|^\alpha). \quad (1.100)$$

Это соотношение следует непосредственно из представления функции Миттаг-Леффлера в виде ряда. Далее, на основе известного результата [41] $E_{1/2,1}(-z) = e^{z^2} \operatorname{erfc}(z)$, где $\operatorname{erfc}(z) = (2/\sqrt{\pi}) \int_z^\infty dx e^{-x^2}$ — дополнительная функция ошибок, уравнение (1.98) при $\alpha = 1/2$ принимает форму

$$\mathcal{P}(y) = H(\sigma y) \left[\frac{1}{\sqrt{\pi|y|}} - e^{|y|} \operatorname{erfc}(\sqrt{|y|}) \right]. \quad (1.101)$$

График этой плотности вероятности показан на рисунке 1.2.

1.3.4 Представление $\mathcal{P}(y)$ в виде ряда

Для полноты изучения альтернативных форм предельной плотности вероятности найдём также её представление в виде ряда. Это оказывается особенно удобным для численного нахождения значений $\mathcal{P}(y)$ при малых $|y|$, в то время как представления в виде полученных интегральных преобразований при малых значениях $|y|$ являются неэффективными. Исходным пунктом будет использование предельной плотности вероятности в терминах обратного преобразования Меллина $\mathcal{P}(y) = (2\pi i)^{-1} \int_{c-i\infty}^{c+\infty} d\eta S(\eta)$, где

$$S(\eta) = \Gamma(1 - \alpha\eta) \frac{\sin[\phi(y)\eta]}{\sin(\pi\eta)} |y|^{\alpha\eta-1} \quad (1.102)$$

[см. уравнение (1.76)]. Для нахождения этого интеграла мы замкнём контур интегрирования полуокружностью C_R с радиусом R , которая лежит в правой полуплоскости для комплексного переменного η [полагаем, что эта полуокружность не пересекает ни одну точку сингулярности $S(\eta)$]. Тогда, устремляя радиус $R \rightarrow \infty$, на основании формулы Стирлинга для гамма-функции [38] можно показать, что вклад в интеграл по контуру C_R будет стремиться к 0. А поэтому, согласно теореме о вычетах (см., например, книгу [42]), мы имеем $\mathcal{P}(y) = -\sum_j \text{Res}(S, \eta_j)$, где $\text{Res}(S, \eta_j)$ обозначает вычет $S(\eta)$ при $\eta = \eta_j$, сумма берётся по всем полюсам функции $S(\eta)$ внутри контура L , а знак “ $-$ ” возникает из-за направления контура L .

В соответствии с уравнением (1.102), полюсы $S(\eta)$ являются следствием простых полюсов $\eta_n = n/\alpha$ ($n \geq 1$) гамма-функции $\Gamma(1 - \alpha\eta)$ и простых полюсов $\eta_m = m$ ($m \geq 1$) функции $1/\sin(\pi\eta)$. Если параметр α будет иррациональным, то множества полюсов $\{\eta_n\}$ and $\{\eta_m\}$ не пересекаются, а значит все полюса $S(\eta)$ также будут простыми. Впрочем, если α — рационально, то некоторые (или все при $\alpha = 1$) полюса из множества $\{\eta_n\}$ будут совпадать с некоторыми (или всеми) полюсами из множества $\{\eta_m\}$, а значит в точках совпадения функция $S(\eta)$ будет иметь полюса второго порядка. Из-за такого отличия для иррациональных и рациональных значений параметра α , мы рассмотрим данные ситуации отдельно.

Иррациональные значения α .

В этом случае предельная плотность вероятности записывается в виде $\mathcal{P}(y) = -\sum_{n=1}^{\infty} \text{Res}(S, n/\alpha) - \sum_{m=1}^{\infty} \text{Res}(S, m)$. Следовательно, принимая во внимание формулу $\Gamma(1 - \alpha\eta)|_{\eta=n/\alpha+\xi} \sim (-1)^n/[\alpha\Gamma(n)\xi]$ и $1/\sin(\pi\eta)|_{\eta=m+\xi} \sim (-1)^m/(\pi\xi)$ при $\xi \rightarrow 0$, а также используя формулу отражения Эйлера $\Gamma(1 - \alpha m) = \pi/[\Gamma(\alpha m) \sin(\pi\alpha m)]$, мы находим

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(y) = & \frac{1}{\alpha} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1} \sin[\phi(y)n/\alpha]}{\Gamma(n) \sin(\pi n/\alpha)} |y|^{n-1} \\ & + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^{m-1} \sin[\phi(y)m]}{\Gamma(\alpha m) \sin(\pi\alpha m)} |y|^{\alpha m-1}. \end{aligned} \quad (1.103)$$

Рациональные значения α .

Когда хвостовой параметр α будет рациональным числом, т. е. даётся несократимой дробью $\alpha = l/p$, где $l(\geq 1)$ и $p(\geq 1)$ – натуральные числа, удовлетворяющие условию $l \leq 2p$, то простые полюса $\Gamma(1 - p\eta/l)$ с порядковыми номерами $n = lk$ ($k = 1, 2, \dots$) и простые полюса $1/\sin(\pi\eta)$ с номерами $m = pk$ совпадают. А поэтому функция $S(\eta)$ при $\eta = pk$ будет иметь полюса второго порядка. Исходя из этого, удобно представить предельную плотность вероятности в форме

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(y) = & - \sum_{\substack{n=1 \\ (n \neq l, 2l, \dots)}}^{\infty} \text{Res}(S, pn/l) - \sum_{\substack{m=1 \\ (m \neq p, 2p, \dots)}}^{\infty} \text{Res}(S, m) \\ & - \sum_{k=1}^{\infty} \text{Res}(S, pk), \end{aligned} \quad (1.104)$$

где последняя сумма включает в себя вычеты $S(k)$ в полюсах второго порядка. Используя приведённые выше результаты для простых полюсов $S(\eta)$ и асимптотическую формулу [38] $\Gamma(1 - l\eta/p)|_{\eta=pk+\xi} \sim (-1)^{lk}(p/l)[\xi^{-1} - (l/p)\psi(lk)]/\Gamma(lk)$ ($\xi \rightarrow 0$) [здесь $\psi(x) = d \ln \Gamma(x)/dx - \psi$ (или дигамма) функция], из выражения (1.104) получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(y) = & \frac{p}{l} \sum_{\substack{n=1 \\ (n \neq l, 2l, \dots)}}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1} \sin[\phi(y)pn/l]}{\Gamma(n) \sin(\pi pn/l)} |y|^{n-1} \\ & + \sum_{\substack{m=1 \\ (m \neq p, 2p, \dots)}}^{\infty} \frac{(-1)^{m-1} \sin[\phi(y)m]}{\Gamma(lm/p) \sin(\pi lm/p)} |y|^{lm/p-1} \\ & + \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{pk+lk}}{\Gamma(lk)} \left([\psi(lk) - \ln |y|] \sin[\phi(y)pk] \right. \\ & \left. - \frac{p}{l} \phi(y) \cos[\phi(y)pk] \right) |y|^{lk-1}. \end{aligned} \quad (1.105)$$

Заметим, что если $\alpha \in (0, 1)$ и $\alpha_+ \neq \alpha_-$, то функция $\phi(y)$ даётся уравнением (1.65). В этом случае уравнения (1.103) и (1.105) сводятся к (1.99), а значит и к (1.98), т. е. выражаются с помощью функции Миттаг-

Леффлера. Если $\alpha \in (1, 2)$ и $\alpha_+ \neq \alpha_-$, то $\mathcal{P}(y)$ также может быть выражена в терминах функции Миттаг-Леффлера. Действительно, используя определение (1.67), а также соотношения $\sum_{n=0}^{\infty} (\pm 1)^n |y|^n / n! = e^{\pm |y|}$ и $\sum_{n=1}^{\infty} |y|^{\alpha n} / \Gamma(\alpha n) = E_{\alpha, 0}(|y|^\alpha) = |y|^\alpha E_{\alpha, \alpha}(|y|^\alpha)$, уравнения (1.103) и (1.105) легко привести к следующему виду

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(y) = & H(\sigma y) \left(\frac{e^{|y|}}{\alpha} - |y|^{\alpha-1} E_{\alpha, \alpha}(|y|^\alpha) \right) \\ & + H(-\sigma y) \frac{e^{-|y|}}{\alpha}. \end{aligned} \quad (1.106)$$

Также стоит сказать, что разложения (1.103) и (1.105) имеют существенное отличие, а именно: первый ряд содержит только степенные функции, в то время как второй и логарифмическую.

1.4 Поведение $\mathcal{P}(y)$ на малых и больших расстояниях

Асимптотическое поведение при малых значениях $|y|$ предельной плотности вероятности $\mathcal{P}(y)$ полностью описывается разложениями (1.103) и (1.105). В то время, как для описания асимптотического поведения $\mathcal{P}(y)$ при больших $|y|$, удобно использовать представление предельной плотности в виде преобразования Лапласа (1.78). В соответствии с леммой Ватсона [42], асимптотика $\mathcal{P}(y)$ при $|y| \rightarrow \infty$ будет определяться разложением функции $(\sin[\phi(y)]x^\alpha) / (1 + 2 \cos[\phi(y)]x^\alpha + x^{2\alpha})$ при $x \rightarrow \infty$. Следовательно, используя выражение [43]

$$\frac{\sin[\phi(y)]x^\alpha}{1 + 2 \cos[\phi(y)]x^\alpha + x^{2\alpha}} = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} \sin[\phi(y)n] x^{\alpha n} \quad (1.107)$$

($|x| < 1$) и известный интеграл [35]

$$\int_0^{\infty} dx e^{-|y|x} x^{\alpha n} = \frac{\Gamma(1 + \alpha n)}{|y|^{1 + \alpha n}}, \quad (1.108)$$

из уравнения (1.78) имеем

$$\mathcal{P}(y) \sim \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} \sin[\phi(y)n] \frac{\Gamma(1 + \alpha n)}{|y|^{1+\alpha n}} \quad (1.109)$$

при $|y| \rightarrow \infty$. При всех рассматриваемых значениях параметра α ниже мы приведёт асимптотику $\mathcal{P}(y)$ при $|y| \rightarrow 0$ и $|y| \rightarrow \infty$ с учётом только главных членов.

1. $\alpha \in (0, 1)$, $\alpha_+ \neq \alpha_-$.

В данном случае двузначная функция $\phi(y)$ даётся выражением (1.65), также $\mathcal{P}(y)|_{\sigma y < 0} = 0$, а поэтому уравнения (1.99) и (1.109) приводят соответственно к

$$\mathcal{P}(y)|_{\sigma y > 0} \sim \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \frac{1}{|y|^{1-\alpha}} \quad (1.110)$$

($|y| \rightarrow 0$) и

$$\mathcal{P}(y)|_{\sigma y > 0} \sim \frac{1}{\pi} \sin(\pi\alpha) \Gamma(1 + \alpha) \frac{1}{|y|^{1+\alpha}} \quad (1.111)$$

($|y| \rightarrow \infty$).

2. $\alpha \in (1, 2)$, $\alpha_+ \neq \alpha_-$, $l_1 = 0$.

При этих условиях функция $\phi(y)$ задаётся уравнением (1.67), а с учётом $\mathcal{P}(y)|_{\sigma y < 0} = e^{-|y|}/\alpha$, из выражений (1.103), (1.105) и (1.109) мы находим

$$\mathcal{P}(y)|_{\sigma y > 0} \sim \frac{1}{\alpha} - \frac{1}{\Gamma(\alpha)} |y|^{\alpha-1} \quad (1.112)$$

при $|y| \rightarrow 0$ и

$$\mathcal{P}(y)|_{\sigma y > 0} \sim -\frac{1}{\pi} \sin(\pi\alpha) \Gamma(1 + \alpha) \frac{1}{|y|^{1+\alpha}} \quad (1.113)$$

при $|y| \rightarrow \infty$.

3. $\alpha_+ = \alpha_- = \alpha \in (0, 1)$, $u_+ \neq u_-$.

Используя (1.73), легко получить

$$\mathcal{P}(y) \sim \frac{1 + \operatorname{sgn}(\epsilon y)|\epsilon|}{2\Gamma(\alpha)\sqrt{\epsilon^2 + (1 - \epsilon^2)\cos^2(\pi\alpha/2)}} \frac{1}{|y|^{1-\alpha}} \quad (1.114)$$

при $|y| \rightarrow 0$ и

$$\mathcal{P}(y) \sim \frac{[1 + \operatorname{sgn}(\epsilon y)|\epsilon|] \sin(\pi\alpha)\Gamma(1 + \alpha)}{2\pi\sqrt{\epsilon^2 + (1 - \epsilon^2)\cos^2(\pi\alpha/2)}} \frac{1}{|y|^{1+\alpha}} \quad (1.115)$$

при $|y| \rightarrow \infty$. В отличие от первого случая, предельная плотность вероятности является двусторонней и имеет левый и правый хвост с одинаковым хвостовым параметром α .

4. $\alpha_+ = \alpha_- = \alpha \in (1, 2)$, $u_+ \neq u_-$, $l_1 = 0$.

И, наконец, в этот раз имеем

$$\mathcal{P}(y) \sim \mathcal{P}(0) - \frac{1 + \operatorname{sgn}(\epsilon y)|\epsilon|}{2\Gamma(\alpha)\sqrt{\epsilon^2 + (1 - \epsilon^2)\cos^2(\pi\alpha/2)}} |y|^{\alpha-1} \quad (1.116)$$

при $|y| \rightarrow 0$ и

$$\mathcal{P}(y) \sim -\frac{[1 + \operatorname{sgn}(\epsilon y)|\epsilon|] \sin(\pi\alpha)\Gamma(1 + \alpha)}{2\pi\sqrt{\epsilon^2 + (1 - \epsilon^2)\cos^2(\pi\alpha/2)}} \frac{1}{|y|^{1+\alpha}} \quad (1.117)$$

при $|y| \rightarrow \infty$. Заметим, что при $\epsilon = 0$ выражения (1.114)–(1.117) сводятся к полученным в работе [29] для симметрического блуждания.

Как мы видим, во всех четырёх приведённых выше случаях плотность вероятности $\mathcal{P}(y)$ при $|y| \rightarrow \infty$ будет иметь тяжёлые хвосты с тем же хвостовым параметром α , что и минимальный хвостовой индекс для распределения величины скачка $w(\xi)$. Значит момент второго порядка для $\mathcal{P}(y)$ не существует [момент первого порядка тоже не существует, если $\alpha \in (0, 1)$], а поэтому дисперсия положения $Y(t)$ в этих ситуациях является бесконечной при любых t .

1.5 Дробное уравнение для $\mathcal{P}(y)$

При изучении аномальных транспортных и диффузионных процессов значительное внимание уделяется их связи с дробными уравнениями, которые асимптотически следуют из обобщённых основных кинетических уравнений. Так, например, дробные уравнения оказываются крайне полезными при изучении очень важного явления аномальной диффузии [2–4], для которой дисперсия положения частички нелинейна во времени. Это подталкивает нас попытаться найти соотношение между рассматриваемым нами классом случайных блужданий и определённым типом дробных уравнений.

Поскольку мы имеем дело главным образом только с масштабированной координатой положения частицы, то и нужное дробное уравнение мы будем искать для плотности вероятности $\mathcal{P}(y)$. Известно, что дробная по пространственной координате производная Рисса-Феллера ${}_y D_\theta^\gamma$ порядка γ и с коэффициентом асимметрии θ задаётся следующим образом (см., например, статью [46])

$$\mathcal{F}\{{}_y D_\theta^\gamma f(y)\} = -e^{i\text{sgn}(\kappa)\pi\theta/2} |\kappa|^\gamma f_\kappa, \quad (1.118)$$

где $\gamma \in (0, 2]$, $|\theta| \leq \min\{\gamma, 2 - \gamma\}$, и $\mathcal{F}\{f(y)\} = \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{i\kappa y} f(y) = f_\kappa$. Далее, используя это определение и уравнение (1.33), получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{F}\{{}_y D_{-2\varphi/\pi}^\alpha \mathcal{P}(y)\} &= -e^{-i\text{sgn}(\kappa)\varphi} |\kappa|^\alpha \mathcal{P}_\kappa \\ &= -\Phi(\kappa) \mathcal{P}_\kappa. \end{aligned} \quad (1.119)$$

И, наконец, принимая во внимание, что $\mathcal{F}\{\delta(y)\} = 1$ и

$$\mathcal{F}\{\mathcal{P}(y)\} = \frac{1}{1 + \Phi(\kappa)} \quad (1.120)$$

[это следует из соотношения (1.19)], дробное уравнение для предельной плотности вероятности $\mathcal{P}(y)$ может быть записано в следующей форме

$${}_y D_{-2\varphi/\pi}^\alpha \mathcal{P}(y) = \mathcal{P}(y) - \delta(y). \quad (1.121)$$

1.6 Законы аномальной диффузии для изучаемых блужданий

Основываясь на полученных в разделе 1.2 предельных плотностях вероятности $\mathcal{P}(y)$, мы замечаем, что в случаях $l_1 = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \xi w(\xi) \neq 0$ (подраздел 1.2.2); $\alpha = 1$ и $\rho = u_+ \delta_{1\alpha_+} - u_- \delta_{1\alpha_-} \neq 0$ (подраздел 1.2.5); и $\alpha = 2$ (подраздел 1.2.6) блуждающая частица будет иметь одно/двустороннее экспоненциальное распределение, а значит и конечную дисперсию. Следовательно, имеет смысл рассмотреть и соответствующие законы дисперсии. В остальных же случаях, согласно разделу 1.4, плотность вероятности $\mathcal{P}(y)$ имеет тяжёлые хвосты, характеризующиеся бесконечной дисперсией, поэтому говорить о диффузии нет смысла. Найдём возможные законы диффузии для рассматриваемых случайных блужданий.

Дисперсия масштабированного положения $Y(t)$ даётся формулой

$${}_y\sigma^2 = {}_y l_2 - {}_y l_1^2, \quad (1.122)$$

где

$${}_y l_1 = \int_{-\infty}^{\infty} dy y \mathcal{P}(y) \quad \text{и} \quad {}_y l_2 = \int_{-\infty}^{\infty} dy y^2 \mathcal{P}(y) \quad (1.123)$$

— момент первого и второго порядка для $\mathcal{P}(y)$ соответственно. Очевидно, что так как предельная плотность вероятности не зависит от времени, то и дисперсия положения y будет не зависеть от времени, то есть является постоянной. Поэтому для определения типа диффузии следует рассмотреть закон дисперсии для оригинального положения. Как ранее говорилось, при больших значениях времени $P(x, t) \sim a(t) \mathcal{P}[a(t)x]$. Значит момент первого порядка для $X(t)$

$${}_x l_1(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx x P(x, t) \sim \frac{{}_y l_1}{a(t)}, \quad (1.124)$$

а момент второго порядка

$${}_x l_2(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 P(x, t) \sim \frac{{}_y l_2}{a^2(t)}. \quad (1.125)$$

А поэтому дисперсия оригинального положения блуждающей частички равна

$$\begin{aligned} {}_x\sigma^2(t) &= {}_x l_2 - {}_x l_1^2 \sim \frac{y l_2}{a^2(t)} - \frac{y l_1^2}{a^2(t)} \\ &\sim \frac{y \sigma^2}{a^2(t)}. \end{aligned} \quad (1.126)$$

1. *Распределения длины скачка с $\alpha = 1$ и $\rho \neq 0$.*

В данном случае предельная плотность вероятности $\mathcal{P}(y) = e^{-|y|} H(\rho y)$ [формула (1.47)], а значит ${}_y\sigma^2 = 2 - [\text{sgn}(\rho)]^2 = 1$. Учитывая масштабирующую функцию (1.46), закон дисперсию для $X(t)$ имеет вид

$${}_x\sigma^2(t) \sim \frac{\rho^2 \ln^2[1/V(t)]}{V^2(t)} \quad (1.127)$$

при $t \rightarrow \infty$.

2. *Распределения длины скачка с $l_1 \neq 0$.*

Принимая во внимание, что в этом случае $\mathcal{P}(y) = e^{-|y|} H(l_1 y)$ [формула (1.23)], имеем ${}_y\sigma^2 = 2 - [\text{sgn}(l_1)]^2 = 1$. Следовательно, учитывая (1.22), получаем закон дисперсии положения частицы $X(t)$

$${}_x\sigma^2(t) \sim \frac{l_1^2}{V^2(t)} \quad (1.128)$$

при $t \rightarrow \infty$.

3. *Распределения длины скачка с $\alpha = 2$ и $l_1 = 0$.*

Наконец, в последнем из возможных случаев предельная плотность вероятности будет уже двусторонней $\mathcal{P}(y) = \frac{1}{2} e^{-|y|}$ [формула (1.55)]. Отсюда следует ${}_y\sigma^2 = 2 - 0 = 2$, и, с учётом масштабирующую функции (1.54), имеем следующий закон дисперсии для $X(t)$

$${}_x\sigma^2(t) \sim \frac{(u_+ + u_-) \ln[1/V(t)]}{2V(t)} \quad (1.129)$$

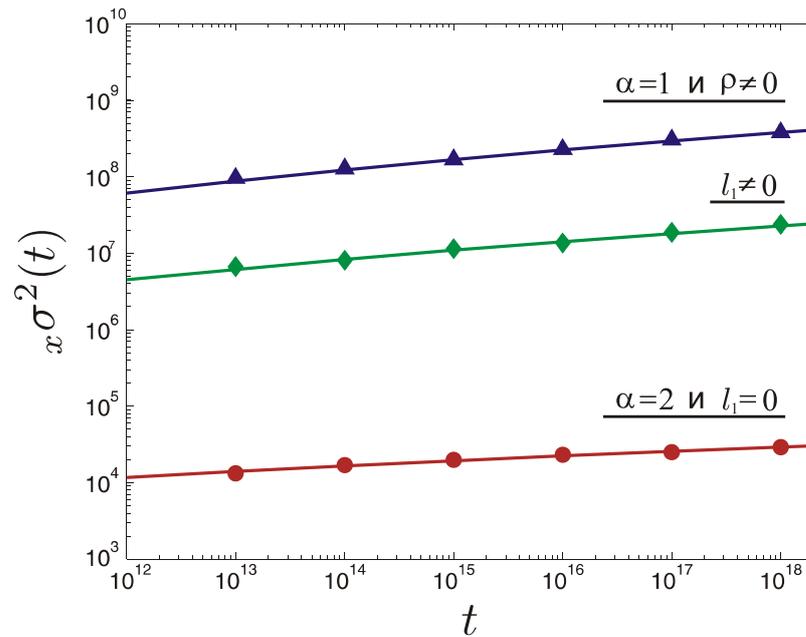


Рисунок 1.6 — Дисперсия положения частицы при больших значениях времени. Сплошные линии показывают теоретическое поведение и построены согласно формулам (1.127), (1.128) и (1.129); треугольники, ромбы и круги отвечают соответствующим численным результатам. Параметры моделирования приведены в разделе 1.7.3.

при $t \rightarrow \infty$.

Как можно заметить из формул (1.128), (1.127) и (1.129), дисперсия оригинального положения блуждающей частицы $X(t)$ будет медленно изменяться при больших значениях времени, а именно

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{x\sigma^2(\mu t)}{x\sigma^2(t)} = 1 \quad (1.130)$$

при всех $\mu > 0$. Это есть следствием того, что дополнительная кумулятивная функция $V(t)$ для наших блужданий является медленно меняющейся на бесконечности. Следовательно, во всех трёх рассматриваемых в этом разделе ситуациях имеет место формула

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{x\sigma^2(t)}{t^\nu} \rightarrow 0 \quad (1.131)$$

для всех $\nu > 0$. Значит дисперсия изменяется медленнее любой положительной степени времени, а поэтому СТРУ в трёх выше приведённых слу-

чаях приводят к появлению аномальной сверхмедленной диффузии. Также отметим, что при $t \rightarrow \infty$ выполняется соотношение $x\sigma^2(t)|_{\text{при } \alpha=1 \text{ и } \rho \neq 0} \gg x\sigma^2(t)|_{\text{при } l_1 \neq 0} \gg x\sigma^2(t)|_{\text{при } \alpha=2 \text{ и } l_1=0}$.

Графики дисперсии оригинального положения частицы при больших временах приведены на рисунке 1.6.

1.7 Численное моделирование изучаемых блужданий

1.7.1 Алгоритм

Нахождение предельной плотности вероятности $\mathcal{P}(y)$ с помощью численного моделирования является не совсем стандартной задачей. Это следует из того, что $\mathcal{P}(y)$ является плотностью вероятности случайной величины $Y(t) = a(t)X(t)$ в пределе $t \rightarrow \infty$. В то время, как при численном моделировании, нам нужно определить поведение величины $Y(T) = a(T)X(T)$ и её плотности вероятности

$$\mathcal{P}_T(y) = \frac{1}{a(T)} P\left(\frac{y}{a(T)}, T\right) \quad (1.132)$$

для некоторого конечного значения $t = T$. Чтобы быть уверенными, что эта плотность вероятности соответствует $\mathcal{P}(y)$, время моделирования (блуждания) T должно быть достаточно велико и превышать среднее время ожидания. Однако, в нашем случае все дробные моменты плотности вероятности времени ожидания не существуют, а поэтому нет и конечного характерного среднего времени для $p(\tau)$. Это означает, что для каждого конечного значения T всегда существует не ничтожно малая вероятность превышения величины $V(T) = \int_T^\infty d\tau p(\tau)$. Следовательно, минимальное значение времени T должно определяться условием $a(T) \ll 1$ или, что эквивалентно, $V(T) \ll 1$. Так как $V(T)$ — медленно меняющаяся функция, то она спадает очень медленно при увеличении T , а значит это время блуждания должно быть очень велико. Но с другой стороны, большие значения T приводят к большому (в среднем) числу скачков частицы $\bar{N}(T)$ за промежуток $(0, T)$. Это следует из того, что при больших временах среднее чис-

ло $\bar{N}(T) \sim V^{-1}(T)$ [44], а значит и время численного счёта будет слишком большим. Таким образом, для выбора приемлемого времени блуждания T нужно одновременно учитывать условие $V(T) \ll 1$ и разумное время численного счёта.

Опишем вкратце саму процедуру моделирования СТРВ. Напомним, что частица начинает блуждание в момент $t = 0$ и имеет позицию $X(0) = 0$. Через время τ_1 частичка делает скачок длиной ξ_1 , следовательно её новая позиция равна $X(\tau_1) = \xi_1$, далее через время τ_2 частичка совершит прыжок величиной ξ_2 и её положение будет $X(\tau_1 + \tau_2) = \xi_1 + \xi_2$, и т. д. Пусть за время блуждания T частица совершит N скачков, т. е. $\sum_{n=1}^N \tau_n \leq T$ и $\sum_{n=1}^{N+1} \tau_n > T$, тогда в финальный момент времени T её положение равно $X(T) = \sum_{n=1}^N \xi_n$, а значит интересующее нас масштабированное положение частицы определяется величиной $Y(T) = a(T)X(T)$ при соответствующих функциях $a(T)$. Повторяя эту процедуру много раз, мы можем найти распределение положения частиц при больших временах.

Времена ожидания τ_n и величины скачков ξ_n имеют соответственно плотности $p(\tau)$ и $w(\xi)$, поэтому важно представить метод их генерирования. Существует много таких подходов, которые отличаются простотой и уместностью в той или иной ситуации [45]. Однако, очень часто наиболее оптимальной процедурой оказывается метод обратного преобразования, который особенно удобен для генерирования случайных величин с положительной плотностью (т. е. не имеющей интервалов, где она равна нулю). Это объясняется тем, что в таком случае кумулятивная функция будет строго возрастать, а значит иметь обратную функцию на всей области определения. В основе данного метода лежит теорема, которая гласит: пусть $F(\varsigma) = \int_{-\infty}^{\varsigma} d\varsigma' f(\varsigma')$ — непрерывная кумулятивная функция распределения и $F^{-1}(U) = \inf\{\xi : F(\xi) = U, 0 < U < 1\}$ — обратная к ней функция, тогда, если U — случайная величина равномерно распределённая на $(0, 1)$, случайная величина $\xi = F^{-1}(U)$ будет иметь кумулятивную функцию распределения F . Таким образом, когда плотности $p(\tau)$ и $w(\xi)$ являются положительными, их кумулятивные функции распределения $F_p(\tau) = \int_0^{\tau} d\xi' f(\xi')$ и $F_w(\xi) = \int_{-\infty}^{\xi} d\xi' w(\xi')$ будут иметь обратные к ним функции, а поэтому мы можем генерировать необходимые нам случайные величины методом обрат-

ного преобразования.

Следовательно, в соответствии с описанной выше процедурой, мы можем представить следующий алгоритм численного моделирования масштабированного положения блуждающей частицы

Задаём начальное положение: $X \leftarrow 0$

Задаём начальное время: $t \leftarrow 0$

Задаём общее время блуждания: T

REPEAT

Генерируем равномерную на $(0,1)$ случайную величину U

Вычисляем время ожидания: $\tau \leftarrow F_p^{-1}(U)$

Вычисляем текущее время блуждания: $t \leftarrow t + \tau$

IF $t \leq T$

THEN

Генерируем равномерную на $(0,1)$ случайную величину U

Вычисляем величину скачка: $\xi \leftarrow F_w^{-1}(U)$

Вычисляем текущую позицию: $X \leftarrow X + \xi$

ELSE

Вычисляем соответствующую масштабирующую функцию $a(T)$

Возвращаем масштабированное положение $Y = a(T)X$

UNTIL $t \leq T$

Заметим, что предложенный алгоритм легко модифицировать для моделирования СТ R W в связанном случае, когда множества ξ_n и τ_n зависят друг от друга, или для численного изучения многомерных СТ R W.

1.7.2 Примеры моделирования предельной плотности $\mathcal{P}(y)$

Для иллюстративного примера моделирования мы используем следующую плотность вероятности времени ожидания

$$p(\tau) = \frac{v \ln^v g}{(g + \tau) \ln^{1+v}(g + \tau)} \quad (1.133)$$

с $v > 0$ и $g > 1$. Выбор этой плотности обуславливается тем, что её кумулятивная функция распределения $F_p(\tau) = \int_0^\tau d\tau' p(\tau')$ легко вычисляется

$$F_p(\tau) = 1 - \frac{\ln^v g}{\ln^v(g + \tau)}, \quad (1.134)$$

а поэтому обратная к $U = F_p(\tau)$ даётся выражением $\tau = g^{(1-U)^{-1/v}} - g$. Исходя из этого, на основе метода обратного преобразования, случайные величины с медленно меняющейся плотностью (1.133) можно генерировать с помощью уравнения

$$\tau_n = g^{(1-U_n)^{-1/v}} - g, \quad (1.135)$$

где $n = 1, 2, \dots$ и U_n — равномерно распределённые на $[0, 1]$ числа. Как мы видим, в этом случае генерация нужных времён ожидания осуществляется очень просто. Для нашего моделирования в качестве параметров в соотношении (1.133) [а значит и в (1.135)] мы выбрали $g = 2, v = 2$ и задали время $T = 10^{15}$, из чего следует $V(T) \approx 4 \cdot 10^{-4}$.

Выбор плотности вероятности $w(\xi)$ для проведения моделирования ограничен двумя условиями. Во-первых, для проверки теоретических результатов нам необходимо рассмотреть все представленные ранее характерные случаи. А, во-вторых, плотность $w(\xi)$ должна, опять же, быть таковой, чтобы для её кумулятивной функции распределения $F_w(\xi) = \int_{-\infty}^{\xi} d\xi' w(\xi')$ легко находилась обратная. Эти условия просто удовлетворить, например, задав такую плотность вероятности величины скачка

$$w(\xi) = \begin{cases} \alpha_- c_- b_-^{\alpha_-} / (b_- - \xi)^{1+\alpha_-}, & \xi < 0 \\ \alpha_+ c_+ b_+^{\alpha_+} / (b_+ + \xi)^{1+\alpha_+}, & \xi \geq 0. \end{cases} \quad (1.136)$$

Здесь $b_{\pm} \in (0, \infty)$ и $c_+ + c_- = 1$, где c_+ и c_- — вероятности того, что $\xi \geq 0$ и $\xi < 0$ соответственно. Из уравнения (1.136) находим

$$F_w(\xi) = \begin{cases} c_- b_-^{\alpha_-} / (b_- - \xi)^{\alpha_-}, & \xi < 0 \\ 1 - c_+ b_+^{\alpha_+} / (b_+ + \xi)^{\alpha_+}, & \xi \geq 0, \end{cases} \quad (1.137)$$

а поэтому величины скачков определяются выражением

$$\xi_n = \begin{cases} -b_-(c_-/U_n)^{1/\alpha_-} + b_-, & U_n < c_- \\ b_+[c_+/(1-U_n)]^{1/\alpha_+} - b_+, & U_n \geq c_- \end{cases} \quad (1.138)$$

Отметим, что применяя предложенный выше алгоритм моделирования СТWR для \mathcal{N} частиц, мы в каждом случае находим соответствующее положение $Y(T)$, а интересующую предельную плотность вероятности приблизительно можно посчитать следующим образом: $\mathcal{P}_T(y) = \mathcal{N}_{\Delta y}/\mathcal{N}$, где $\mathcal{N}_{\Delta y}$ — это число частиц с положением $Y(T) \in [y, y + \Delta y)$. Во всех случаях проведённого численного моделирования мы полагали $\mathcal{N} = 10^5$ и $\Delta y = 10^{-1}$; остальные необходимые параметры приведены ниже.

1. $\alpha \in (0, 1)$, $\alpha_+ \neq \alpha_-$.

В этом случае предельная плотность вероятности $\mathcal{P}(y)$ зависит только от минимального значения хвостового индекса α [см., например, уравнение (1.66)]. Однако, для численного определения предельной плотности $\mathcal{P}_T(y)$ с помощью предложенной процедуры, все параметры в уравнениях (1.133) и (1.136) должны быть заданы. В дополнение к отмеченным ранее значениям выбранных параметров, мы задаём $\alpha = \alpha_+ = 1/2$, $c_+ = 2/3$, $b_+ = 1$ и $\alpha_- = 3/4$, $c_- = 1/3$, $b_- = 1$. При этих параметрах выражение (1.32) приводит к $a(T) \approx 1.2 \cdot 10^{-7}$, а численно полученные значения $\mathcal{P}_T(y)$ показаны на рисунке 1.2 треугольниками.

2. $\alpha \in (1, 2)$, $\alpha_+ \neq \alpha_-$, $l_1 = 0$.

Исходя из того, что в данной ситуации момент первого порядка плотности вероятности (1.136) даётся выражением

$$l_1 = \frac{c_+b_+}{\alpha_+ - 1} - \frac{c_-b_-}{\alpha_- - 1}, \quad (1.139)$$

($\alpha_{\pm} > 1$) условие $l_1 = 0$ влечёт за собой то, что параметры $w(\xi)$ должны удовлетворять ограничениям $c_+b_+/(\alpha_+ - 1) = c_-b_-/(\alpha_- - 1)$. В частности, если $\alpha = \alpha_+ = 5/4$, $c_+ = 5/22$, $b_+ = 1$ и $\alpha_- = 37/20$, $c_- = 17/22$, $b_- = 1$, тогда $c_+b_+/(\alpha_+ - 1) = c_-b_-/(\alpha_- - 1) = 10/11$, $a(T) \approx 1.8 \cdot 10^{-3}$, и

результаты моделирования $\mathcal{P}_T(y)$ изображены на рисунке 1.3.

$$3. \quad \alpha_+ = \alpha_- = \alpha \in (0, 1), \quad u_+ \neq u_-.$$

Согласно уравнению (1.136) и асимптотической формуле (1.13), параметры u_{\pm} выражаются следующим образом: $u_{\pm} = \alpha_{\pm} c_{\pm} b_{\pm}^{\alpha_{\pm}}$. Учитывая, что $\alpha_+ = \alpha_- = \alpha$ и $u_+ \neq u_-$, т. е. $c_+ b_+^{\alpha_+} \neq c_- b_-^{\alpha_-}$, мы выбираем $\alpha = 1/2$, $c_+ = 2/3$, $b_+ = 1$ и $c_- = 1/3$, $b_- = 1$. Для этих параметров $u_+ = 1/3$, $u_- = 1/6$ (т. е. $\epsilon = 1/3$), $a(T) \approx 9.3 \cdot 10^{-8}$, результаты численного моделирования можно видеть на рисунке 1.4.

$$4. \quad \alpha_+ = \alpha_- = \alpha \in (1, 2), \quad u_+ \neq u_-, \quad l_1 = 0.$$

И, наконец, в этот раз условия $u_+ \neq u_-$ и $l_1 = 0$ приводят соответственно к $c_+ b_+^{\alpha} \neq c_- b_-^{\alpha}$ и $c_+ b_+ = c_- b_-$. Задавая $\alpha = 5/4$, $c_+ = 1/5$, $b_+ = 5$ и $c_- = 4/5$, $b_- = 5/4$, получаем $u_+ = 5^{5/4}/4 \approx 1.87$, $u_- = (5/4)^{5/4} \approx 1.32$ [т.е., $\epsilon = (\sqrt{2} - 1)/(\sqrt{2} + 1) \approx 0.17$], $a(T) \approx 5.2 \cdot 10^{-4}$ и результаты моделирования $\mathcal{P}_T(y)$ показаны на рисунке 1.5.

Как мы видим из этих рисунков, полученные численным методом результаты очень хорошо соответствуют теоретическим предсказаниям. Следует также сказать, что предложенный алгоритм и в других рассматриваемых нами случаях, а именно для предельной плотности вероятности при $l_1 \neq 0$, $\alpha = 1$, $\alpha = 2$ с $l_1 = 0$ [а также для рассмотренного нами ранее случая $w(-\xi) = w(\xi)$], тоже даёт очень хорошее согласование теоретических и численных результатов. Однако, так как теоретические плотности $\mathcal{P}(y)$ в этих случаях будут иметь простой вид одно- или двусторонней экспоненциальной функции, то, во избежание излишней громоздкости, мы не будем приводить полученные в этих условиях с помощью численного моделирования плотности $\mathcal{P}(y)$.

1.7.3 Примеры моделирования дисперсии положения $X(t)$

Численное моделирование поведения дисперсии оригинального положения частицы проводилось на основе описанного выше алгоритма. Сначала мы получали положение $X_i(T)$ ($i = 1 \dots \mathcal{N}$) для каждой из \mathcal{N} частиц

в определённый момент T , а затем искали значения дисперсии полученной совокупности случайных величин $X_i(T)$ согласно известной формуле

$${}_x\tilde{\sigma}^2(T) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} X_i^2(T) - \left[\frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} X_i(T) \right]^2. \quad (1.140)$$

Плотности времени ожидания и величины скачка были выбраны такими же, как и ранее, т. е. $p(\tau)$ задавалась формулой (1.133) с $g = 2, v = 2$ и $w(\xi)$ определялась согласно (1.136). Моделирование проводилось для $\mathcal{N} = 10^5$ частиц при разных значений времени (их можно увидеть на рисунке 1.6), остальные используемые параметры следующие:

1. Для случая $\alpha = 1$ и $\rho \neq 0$ мы выбрали $\alpha_+ = 1, b_+ = 1, c_+ = 2/3$ и $\alpha_- = 1, b_- = 1, c_- = 1/3$, т. е. $\rho = 2/3$;

2. В случае $l_1 \neq 0$ задали $\alpha_+ = 5/4, b_+ = 1, c_+ = 1/2$ и $\alpha_- = 7/4, b_- = 1, c_- = 1/2$, а значит $l_1 = 4/3$;

3. И, наконец, при $\alpha = 2$ и $\rho \neq 0$ мы взяли $\alpha_+ = 2, b_+ = 1/2, c_+ = 4/5$ и $\alpha_- = 2, b_- = 2, c_- = 1/5$, а следовательно $l_1 = 0, u_+ = 2/5$ и $u_- = 8/5$.

Полученные численным методом законы поведения дисперсии положения частички $X(t)$ при больших временах показаны на рисунке 1.6 и находятся в прекрасном соответствии с теоретическими результатами.

1.8 Выводы к разделу 1

Мы изучили асимптотические (по времени) решения для непрерывных во времени случайных блужданий, которые характеризуются сверхтяжёлыми хвостами распределения времени ожидания и асимметрическими тяжёлыми распределениями величины скачка. Главным образом наш интерес был сосредоточен на нахождении плотности вероятности $\mathcal{P}(y)$ масштабированного положения $Y(t) = a(t)X(t)$ блуждающей частички, то есть оригинального положения $X(t)$ умноженного на специально подобранную масштабирующую функцию $a(t)$, которая зависит от времени, и чей вид определяется исходя из асимптотических свойств плотностей вероятности времени ожидания $p(\tau)$ и длины скачка $w(\xi)$.

Показано, что в отличие от масштабирующих функций, поведение предельных плотностей вероятности будет зависеть только от асимптотики на бесконечности распределения длины скачка, при этом основную роль играет наименьший из хвостовых параметров α . Искомые плотности $\mathcal{P}(y)$ получены в терминах обратного преобразования Фурье, а для детального изучения свойств они выражены также в виде преобразования Лапласа, H - функций Фокса и рядов. Кроме того, установлено, что плотность вероятности $\mathcal{P}(y)$ удовлетворяет определённое дробное уравнение.

В работе исследовано поведение полученных решений при малых и больших значениях положения частицы. Определено, что хвосты $\mathcal{P}(y)$ могут быть либо экспоненциальными, либо тяжёлыми с тем хвостовым индексом, что и наименее убывающий хвост распределения величины скачка. Исходя из этого, сделано заключение, что когда хоть один из хвостов предельной плотности вероятности будет тяжёлым, дисперсия положения частички является бесконечной даже при конечном времени блуждания, а в остальных случаях получен закон дисперсии блуждающей частички при больших значениях времени.

И, наконец, мы провели численное моделирование изучаемых непрерывных во времени случайных блужданий, результаты которого находятся в полном соответствии с теоретическими предсказаниями.

2 РЕЖИМЫ РЕЛАКСАЦИИ В ДВУХУРОВНЕВЫХ СИСТЕМАХ

Релаксационные процессы, описывающие переход макроскопической системы из одного равновесного состояния в другое, являются предметом большого интереса. В первую очередь это связано с тем, что изучение такого рода процессов позволяет извлечь много важной информации о механизмах релаксации в целом. Такие релаксационные процессы зачастую изучаются при условии, что на систему в течении длительного времени действует обобщенная постоянная сила, которая может быстро выключаться (см. детали в работе [47]). В этом случае одной из основных характеристик процесса является экстенсивная термодинамическая переменная, сопряженная с постоянной силой. В частности, для диэлектрической проницаемости (см., например, [48–50] и соответствующие там ссылки) парой величин, обобщенной силой и сопряженной переменной, будут внешнее электрическое поле и электрический дипольный момент релаксирующей системы. Аналогично для магнитной релаксации [51–53] соответствующей парой сопряженных величин будут внешнее магнитное поле и магнитный момент системы.

Важной характеристикой любых релаксационных процессов является закон релаксации, т.е. поведение во времени правильно нормируемой (безразмерной) сопряженной величины. В самой простой ситуации, когда скорость изменения этой функции пропорциональна её значению, релаксационный закон является экспоненциальным. Однако, многие системы демонстрируют аномальную неэкспоненциальную релаксацию [4]. Например, медленная магнитная релаксация была обнаружена в системах одиночных молекул [54–56] и одноцепочных магнитов [57–59].

Существует широкий класс систем, включая аномальные, чьи релаксационные свойства полностью описываются индивидуальными свойствами их структурных элементов (таких как, например, одномолекулярные магниты, одноцепочные магниты, однодоменные ферромагнитные частицы и т.д.). В частности, это происходит, когда параметр состояния каждого элемента системы изменяется под действием дихотомического случайного процесса. В этой работе мы аналитически изучаем некоторые характеристики, описывающие релаксацию в двухуровневых системах.

2.1 Дихотомическая модель релаксации

2.1.1 Описание модели

Рассмотрим систему, состоящую из множества одинаковых объектов, каждый из которых может поочередно в течении случайного времени находиться в одном из двух возможных состояний. Такие модели широко используются для описания релаксационных процессов в физических системах, чьи структурные элементы приблизительно характеризуются двумя равновесными состояниями.

Магнитные системы, составляющими элементами которых являются одноосные однодоменные ферромагнетики, представляют важный класс такого рода систем. Намагниченность каждой из частиц имеет два равновесных направления, но в связи с тепловыми флуктуациями мгновенное направление намагниченности может быть случайным. В этом случае магнитная релаксация описывается на основе стохастического уравнения Ландау-Лифшица или Ландау-Лифшица-Гильберта для динамики намагниченности, или соответствующего уравнения Фоккера-Планка для плотности вероятности направления намагниченности [52, 60–62]. Этот подход довольно общий и может быть применён для выражения законов релаксации через параметры системы. В частности, он был использован для приблизительного описания особенностей магнитной релаксации, возникающей при диполь-дипольном взаимодействии частиц [63–65] и вращающегося внешнего магнитного поля [66, 67].

Тем не менее, такой метод описания технически довольно трудный. Главные сложности возникают из-за необходимости принимать во внимание все возможные направления намагниченности. Однако роль состояний (направлений намагниченности), которые существенно отличаются от равновесных, значительно уменьшается при понижении температуры. Следовательно, если общая вероятность таких состояний довольно мала, параметр состояния частиц, описывающий релаксационный процесс, может приблизительно быть представлен как дихотомический случайный процесс. Такие дихотомические приближения позволяют нам детально изучить процесс релаксации в широком классе двухуровневых систем.

Следуя дихотомическому приближению, мы связываем параметр состояния каждого структурного элемента системы с дихотомическим (телеграфным) процессом $f(t)$, который принимает значения -1 и 1 , а также имеет начальное условие $f(0) = 1$, см. Рис. 2.1.

Этот процесс характеризуется так называемыми временами ожидания τ_j ($j = \overline{1, \infty}$), т.е. временами между последовательными скачками функции $f(t)$, которые являются независимыми случайными переменными. Мы также полагаем, что времена ожидания τ_{2j-1} системы в верхнем положении (когда $f(t) = 1$) и времена ожидания τ_{2j} системы в нижнем положении (когда $f(t) = -1$) распределены с плотностями вероятности $p^+(\tau)$ и $p^-(\tau)$ соответственно.

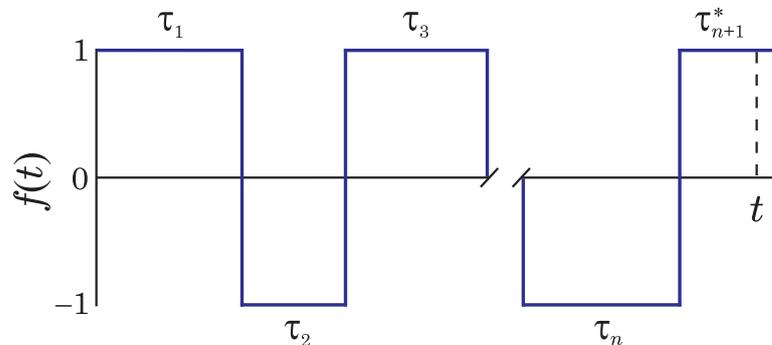


Рисунок 2.1 — Пример траектории дихотомического процесса $f(t)$ с четным числом скачков на интервале $(0, t)$.

Дихотомический процесс - это простейший случайный процесс, играющий важную роль во многих приложениях. Если плотности вероятности $p^\pm(\tau)$ экспоненциальные, то важные свойства этого процесса описываются телеграфным [если $p^+(\tau) = p^-(\tau)$] или обобщенным телеграфным [если $p^+(\tau) \neq p^-(\tau)$] уравнением [68–70]. Поскольку мы хотим изучить влияние различных распределений времен ожидания на характер релаксации в двухуровневых системах, то для этой цели наиболее удобно использовать формализм непрерывных во времени случайных блужданий (CTRW) [2, 3, 13]. При таком подходе мы для начала определим плотность вероятности величины Δ_t — разницы общих времен пребывания функции $f(t)$ в положениях

1 и -1 на интервале $(0, t)$, т.е. имеем

$$\Delta_t = \int_0^t dt' f(t'). \quad (2.1)$$

Также мы детально изучим зависимость от времени закона релаксации

$$\mu(t) = \Pr\{f(t) = 1\} - \Pr\{f(t) = -1\}, \quad (2.2)$$

где $\Pr\{\cdot\}$ обозначает вероятность события в фигурных скобках.

2.1.2 Общие результаты

Плотность вероятности $P(\Delta, t)$ того, что разница времен Δ_t равна Δ в фиксированный момент t , может быть записана следующим образом:

$$P(\Delta, t) = \langle \delta(\Delta_t - \Delta) \rangle, \quad (2.3)$$

где $\delta(\cdot)$ — дельта-функция Дирака и угловые скобки показывают усреднение по всем возможным реализациям процесса $f(t)$. Поскольку $\Delta_t \in (-t, t)$, имеем $P(\Delta, t) = 0$ при $|\Delta| > t$, и из условия нормировки для $P(\Delta, t)$ следует $\int_{-t}^t d\Delta P(\Delta, t) = 1$. Допустим, что процесс $f(t)$ имеет точно n ($n = \overline{0, \infty}$) скачков на интервале $(0, t)$. Тогда плотность вероятности того, что к моменту t было n скачков и $\Delta_t = \Delta$, дается выражением

$$P^{(n)}(\Delta, t) = \langle \delta(\Delta_t - \Delta) \rangle_n \quad (2.4)$$

($\langle \cdot \rangle_n$ — усреднения по всем подходящим траекториям). Таким образом, мы можем представить $P(\Delta, t)$ в форме

$$P(\Delta, t) = \sum_{n=0}^{\infty} P^{(n)}(\Delta, t). \quad (2.5)$$

Согласно определению (2.4), вероятность того, что данная траектория

$f(t)$ имеет ровно n скачков на интервале $(0, t)$ дается выражением

$$W^{(n)}(t) = \int_{-t}^t d\Delta P^{(n)}(\Delta, t), \quad (2.6)$$

и условие нормировки для плотности вероятности $P(\Delta, t)$ дает $\sum_{n=0}^{\infty} W^{(n)}(t) = 1$. Следующий шаг – это выражение $W^{(n)}(t)$ и $P^{(n)}(\Delta, t)$ в терминах плотностей времен ожидания $p^{\pm}(\tau)$. Для этого мы сначала получим представление разности времен $\Delta_t^{(n)}$ для траектории с n скачками на интервале $(0, t)$. Очевидно, что $\Delta_t^{(0)} = t$ и, если $n \geq 1$, то

$$\Delta_t^{(n)} = \sum_{j=1}^n (-1)^{j-1} \tau_j + (-1)^n \tau_{n+1}^*, \quad (2.7)$$

где

$$\tau_{n+1}^* = t - \sum_{j=1}^n \tau_j \leq \tau_{n+1}. \quad (2.8)$$

Вероятность, что траектория дихотомического процесса $f(t)$ не имеет скачков на интервале $(0, t)$ [т.е. вероятность, что $\tau_1 \geq t$], записывается в виде

$$W^{(0)}(t) = \int_t^{\infty} d\tau p^+(\tau). \quad (2.9)$$

Предположим сейчас, что процесс $f(t)$ имеет $n \geq 1$ скачков на интервале $(0, t)$. Если эти скачки происходят в интервалах $(\sum_{j=1}^k \tau_j, \sum_{j=1}^k \tau_j + d\tau_k)$ с $k = \overline{1, n}$, тогда вероятность $dW^{(n)}(t)$ такого процесса дается

$$dW^{(n)}(t) = \left(\prod_{j=1}^n d\tau_j p_j(\tau_j) \right) \int_{t - \sum_{j=1}^n \tau_j}^{\infty} d\tau p_{n+1}(\tau). \quad (2.10)$$

Здесь $p_j(\tau) = p^+(\tau)$ или $p^-(\tau)$, если j нечетно или четно соответственно. Уместно напомнить, что уравнение (2.10) получено исходя из условий, что скачки $f(t)$ независимые события с вероятностями $p_j(\tau_j) d\tau_j$ и $(n+1)$ -й скачек происходит вне интервала $(0, t)$. Во избежание недоразумения от-

метим, что времена τ_j в уравнении (2.10) (и все времена в вероятностных выражениях ниже) следует интерпретировать не как случайные величины, а как переменные интегрирования. Представляя n -мерную область интегрирования $\Omega_n(t)$, определенную условием $\sum_{j=1}^n \tau_j \leq t$, и заменяя нижний предел интегрирования в (2.10) на τ_{n+1}^* , мы можем записать вероятность $W^{(n)}(t)$ в форме (см. также работу [71])

$$W^{(n)}(t) = \int_{\Omega_n(t)} \left(\prod_{j=1}^n d\tau_j p_j(\tau_j) \right) \int_{\tau_{n+1}^*}^{\infty} d\tau p_{n+1}(\tau). \quad (2.11)$$

Наконец, используя приведённые выше результаты, мы получаем

$$P(\Delta, t) = W^{(0)}(t)\delta(t - \Delta) + \tilde{P}(\Delta, t), \quad (2.12)$$

где $\tilde{P}(\Delta, t) = \sum_{n=1}^{\infty} P^{(n)}(\Delta, t)$ — это регулярная часть плотности вероятности $P(\Delta, t)$ и

$$P^{(n)}(\Delta, t) = \int_{\Omega_n(t)} \left(\prod_{j=1}^n d\tau_j p_j(\tau_j) \right) \int_{\tau_{n+1}^*}^{\infty} d\tau p_{n+1}(\tau) \delta(\Delta_t^{(n)} - \Delta). \quad (2.13)$$

Как видно из формул (2.12) и (2.13), $P(\Delta, t)$ зависит от плотностей $p^+(\tau)$ и $p^-(\tau)$ довольно сложным образом. Следовательно, имеет смысл найти связь между $P(\Delta, t)$ и $p^{\pm}(\tau)$ в пространстве Фурье-Лапласа. Для этого мы для начала определим преобразование Фурье функции $\varphi(\Delta)$ как $\mathcal{F}\{\varphi(\Delta)\} = \varphi_k = \int_{-\infty}^{\infty} d\Delta e^{ik\Delta} \varphi(\Delta)$ ($-\infty < k < \infty$) и преобразование Лапласа функции $\psi(t)$ как $\mathcal{L}\{\psi(t)\} = \psi_s = \int_0^{\infty} dt e^{-st} \psi(t)$ ($\text{Re } s > 0$). Далее, применяя преобразование Фурье-Лапласа для $P(\Delta, t)$, определенного как $P_{ks} = \mathcal{L}\{\mathcal{F}\{P(\Delta, t)\}\}$, из уравнения (2.12) находим

$$P_{ks} = \frac{1 - p_{s-ik}^+}{s - ik} + \tilde{P}_{ks}, \quad (2.14)$$

где $\tilde{P}_{ks} = \sum_{n=1}^{\infty} P_{ks}^{(n)}$ и, согласно (2.13), получаем

$$P_{ks}^{(n)} = \int_0^{\infty} dt e^{-st} \left[\int_{\Omega_n(t)} \left(\prod_{j=1}^n d\tau_j p_j(\tau_j) \right) e^{ik\Delta_t^{(n)}} - \int_{\Omega_{n+1}(t)} \left(\prod_{j=1}^{n+1} d\tau_j p_j(\tau_j) \right) e^{ik\Delta_t^{(n)}} \right]. \quad (2.15)$$

Для вычисления $P_{ks}^{(n)}$ мы используем формулу $\Delta_t^{(n)} = (-1)^n t - \sum_{j=1}^n [(-1)^n + (-1)^j] \tau_j$, которая следует из выражений (2.7) и (2.8), и представляем внутренние интегралы в виде

$$\int_{\Omega_n(t)} \prod_{j=1}^n d\tau_j p_j(\tau_j) = \int_0^t d\tau_1 p_1(\tau_1) \int_0^{t-\tau_1} d\tau_2 p_2(\tau_2) \dots \int_0^{t-\sum_{j=1}^{n-1} \tau_j} d\tau_n p_n(\tau_n). \quad (2.16)$$

С помощью этих результатов и непосредственного интегрирования в уравнении (2.15) имеем

$$P_{ks}^{(2m-1)} = (p_{s-ik}^+)^m (p_{s+ik}^-)^{m-1} \frac{1 - p_{s+ik}^-}{s + ik}, \quad (2.17)$$

$$P_{ks}^{(2m)} = (p_{s-ik}^+ p_{s+ik}^-)^m \frac{1 - p_{s-ik}^+}{s - ik}$$

($m = \overline{1, \infty}$). Наконец, используя выражение (2.17) и формулу для бесконечной геометрической прогрессии, $\sum_{n=1}^{\infty} r^n = r/(1-r)$ ($|r| < 1$), преобразование Фурье-Лапласа $\tilde{P}(\Delta, t)$ может быть записано следующим образом

$$\tilde{P}_{ks} = \frac{p_{s-ik}^+}{1 - p_{s-ik}^+ p_{s+ik}^-} \left(\frac{1 - p_{s+ik}^-}{s + ik} + \frac{1 - p_{s-ik}^+}{s - ik} p_{s+ik}^- \right). \quad (2.18)$$

Отметим, что уравнение (2.18) с $p^{\pm}(\tau) = p(\tau)$ было получено и исследовано при больших значениях времени в некоторых частных случаях в работе [72].

Уравнения (2.14) и (2.18) представляют искомую плотность вероятности $P(\Delta, t)$ в пространстве Фурье-Лапласа. Из-за совместной зависимости P_{ks} от k и s вычисление $P(\Delta, t)$ с помощью обратного преобразования Фурье-Лапласа P_{ks} возможно только в некоторых исключительных случа-

ях. В частности, если $f(t)$ – обобщенный телеграфный процесс, характеризующийся экспоненциальными плотностями времён ожидания

$$p^\pm(\tau) = \lambda_\pm e^{-\lambda_\pm \tau} \quad (2.19)$$

(параметр интенсивности $\lambda_\pm > 0$), тогда

$$P(\Delta, t) = e^{-\lambda_+ t} \delta(t - \Delta) + \frac{\lambda_+}{2} \exp\left(-\frac{\lambda_+ + \lambda_-}{2} t - \frac{\lambda_+ - \lambda_-}{2} \Delta\right) \times \left[I_0\left(\sqrt{\lambda_+ \lambda_- (t^2 - \Delta^2)}\right) + \sqrt{\frac{\lambda_-}{\lambda_+}} \sqrt{\frac{t + \Delta}{t - \Delta}} I_1\left(\sqrt{\lambda_+ \lambda_- (t^2 - \Delta^2)}\right) \right], \quad (2.20)$$

где $I_0(\cdot)$ и $I_1(\cdot)$ – это модифицированные функции Бесселя первого рода и нулевого и первого порядка соответственно. Отметим, что этот результат был ранее получен на основании других методов (см. [70, 73, 74]).

Мы также заинтересованы в нахождении временной зависимости функции релаксации $\mu(t)$. Согласно определению (2.2), эта функция удовлетворяет условиям $\mu(0) = 1$ и $\mu(t) \in [-1, 1]$. Тогда в связи с тем, что $\langle \Delta_t \rangle = \int_0^t dt' \langle f(t') \rangle$ и $\langle f(t) \rangle = \mu(t)$, она может быть представлена в форме $\mu(t) = d\langle \Delta_t \rangle / dt$, которая удобна в случае, если $\langle \Delta_t \rangle$ как функция от времени известна. Однако для изучения зависимости $\mu(t)$ от распределений времён ожидания более удобно использовать представление $\mu(t)$ в виде преобразования Лапласа. Для нахождения этого представления мы сначала выразим функцию релаксации в терминах вероятностей $W^{(n)}(t)$:

$$\mu(t) = W^{(0)}(t) + \sum_{m=1}^{\infty} [W^{(2m)}(t) - W^{(2m-1)}(t)]. \quad (2.21)$$

Далее, применяя преобразование Лапласа к уравнению (2.21) и принимая во внимание, что $W_s^{(0)} = (1 - p_s^+) / s$ и $W^{(n)}(t) = P_k^{(n)}(t)|_{k=0}$, мы получаем

$$\mu_s = \frac{1 - p_s^+}{s} + \sum_{m=1}^{\infty} (P_{ks}^{(2m)} - P_{ks}^{(2m-1)})|_{k=0}. \quad (2.22)$$

И, наконец, используя уравнение (2.17) и проводя суммирование по m , вы-

ражение (2.22) может быть сведено к виду

$$\mu_s = \frac{1 - 2p_s^+ + p_s^+ p_s^-}{s(1 - p_s^+ p_s^-)}. \quad (2.23)$$

Этот результат, который справедлив для произвольных распределений времен ожидания, является нашей основной формулой для изучения релаксации в двухуровневых системах. Перед тем, как продолжить анализ законов релаксации, стоит отметить, что в случае смещенной релаксации [когда $p^+(\tau) \neq p^-(\tau)$] выражение (2.23) эквивалентно следующему интегральному уравнению

$$\begin{aligned} \mu(t) &= \int_0^t d\tau \mu(\tau) \int_0^{t-\tau} d\tau' p^+(\tau') p^-(t - \tau - \tau') \\ &= 1 - 2 \int_0^t d\tau p^+(\tau) + \int_0^t d\tau p^+(\tau) \int_0^{t-\tau} d\tau' p^-(\tau'). \end{aligned} \quad (2.24)$$

В случае несмещенной релаксации [когда $p^\pm(\tau) = p(\tau)$] уравнения (2.23) и (2.24) упрощаются

$$\mu_s = \frac{1 - p_s}{s(1 + p_s)} \quad (2.25)$$

и

$$\mu(t) + \int_0^t d\tau \mu(\tau) p(t - \tau) = 1 - \int_0^t d\tau p(\tau), \quad (2.26)$$

соответственно. Формулы (2.24) и (2.26) показывают, что в общем в процессах релаксации в двухуровневых системах эффекты памяти играют важную роль.

2.2 Законы релаксации

2.2.1 Точные результаты

Рассмотрим двухуровневую систему, характеризующуюся распределениями Эрланга для времен ожидания. Такие плотности даются выражением

$$p^\pm(\tau) = \frac{\lambda_\pm^k \tau^{k-1}}{(k-1)!} e^{-\lambda_\pm \tau}, \quad (2.27)$$

где $k = \overline{1, \infty}$ – параметр формы. Поскольку многие свойства таких систем уже изучены [75], то мы сосредоточим внимание только на законе релаксации $\mu(t)$. Условия $\lambda_+ \neq \lambda_-$ и $\lambda_+ = \lambda_- = \lambda$ соответствуют смещенной и несмещенной релаксации соответственно.

Смещенный случай при $k = 1$.

При $k = 1$ плотности Эрланга (2.27) переходят в экспоненциальные. Согласно уравнению (2.19), в случае $p_s^\pm = \lambda_\pm / (\lambda_\pm + s)$ формула (2.23) приводит к

$$\mu_s = \frac{s - \lambda_+ + \lambda_-}{s(s + \lambda_+ + \lambda_-)}. \quad (2.28)$$

Применяя к (2.28) обратное преобразование Лапласа [см. [37], уравнение 5.2(5)], мы можем убедиться, что функция релаксации будет чисто экспоненциальной:

$$\mu(t) = \frac{\lambda_- - \lambda_+}{\lambda_+ + \lambda_-} + \frac{2\lambda_+}{\lambda_+ + \lambda_-} e^{-(\lambda_+ + \lambda_-)t}. \quad (2.29)$$

Легко проверить, что эта функция удовлетворяет дифференциальное уравнение

$$\frac{d}{dt}\mu(t) + (\lambda_+ + \lambda_-)\mu(t) + \lambda_+ - \lambda_- = 0 \quad (2.30)$$

($\mu(0) = 1$), которое также следует из (2.24). Таким образом, в этом случае не будет эффектов памяти.

Смещенный случай при $k = 2$.

При $k = 2$ из уравнений (2.27) и (2.23) получаем $p_s^\pm = \lambda_\pm^2 / (s + \lambda_\pm)^2$ и

$$\mu_s = \frac{s^3 + 4as^2 + 4(\nu^2 + ab)s + 4\nu^2 b}{s(s + s_+)(s + s_-)(s + 2a)}, \quad (2.31)$$

где $a = (\lambda_+ + \lambda_-)/2$, $b = (\lambda_- - \lambda_+)/2$, $\nu = \sqrt{\lambda_+ \lambda_-}$, и $s_\pm = a \pm \sqrt{a^2 - 2\nu^2}$. С помощью обратного преобразования Лапласа для (2.31) [см. [37], формула 5.2(19)], для данного класса двухуровневых систем получаем

$$\begin{aligned} \mu(t) = & \frac{\lambda_- - \lambda_+}{\lambda_+ + \lambda_-} \left(1 + \frac{\lambda_+}{\lambda_-} e^{-(\lambda_+ + \lambda_-)t} \right) + \frac{\lambda_+}{\lambda_-} \left[\cosh(\sqrt{a^2 - 2\nu^2} t) \right. \\ & \left. - (\lambda_+ - 3\lambda_-) \frac{\sinh(\sqrt{a^2 - 2\nu^2} t)}{2\sqrt{a^2 - 2\nu^2}} \right] e^{-(\lambda_+ + \lambda_-)t/2}. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Хотя релаксационные функции (2.29) и (2.32) имеют одинаковое предельное значение $\mu(\infty) = (\lambda_- - \lambda_+)/(\lambda_+ + \lambda_-)$, их поведение на конечных временах существенно отличается. В частности, при малых временах функция $1 - \mu(t)$ пропорциональна t и t^2 соответственно. Более того, в отличие от (2.29), релаксационная функция (2.32) при $a^2 - 2\nu^2 > 0$ характеризуется тремя временами релаксации, наибольшее из которых равно $1/s_-$.

Наиболее важное качественное отличие между релаксационными законами (2.29) и (2.32) возникает в случае $a^2 - 2\nu^2 < 0$, т.е. если параметры λ_\pm удовлетворяют условию

$$3 - 2\sqrt{2} < \frac{\lambda_+}{\lambda_-} < 3 + 2\sqrt{2}. \quad (2.33)$$

Поскольку в этой ситуации $\sqrt{a^2 - 2\nu^2} = i\sqrt{2\nu^2 - a^2}$ с $2\nu^2 - a^2 > 0$, то гиперболические функции в уравнении (2.32) должны быть заменены соответствующими тригонометрическими. Значит, вводя период этих функций как $T = 2\pi/\sqrt{2\nu^2 - a^2}$ или

$$T = \frac{4\pi}{\sqrt{6\lambda_+ \lambda_- - \lambda_+^2 - \lambda_-^2}}, \quad (2.34)$$

выражение (2.32) может быть записано в форме

$$\mu(t) = \frac{\lambda_- - \lambda_+}{\lambda_+ + \lambda_-} \left(1 + \frac{\lambda_+}{\lambda_-} e^{-(\lambda_+ + \lambda_-)t} \right) + \frac{\lambda_+}{\lambda_-} \left[\cos\left(\frac{2\pi t}{T}\right) - (\lambda_+ - 3\lambda_-) \frac{T}{4\pi} \sin\left(\frac{2\pi t}{T}\right) \right] e^{-(\lambda_+ + \lambda_-)t/2}. \quad (2.35)$$

Согласно этой формуле функция $\mu(t)$ стремится к предельному значению $\mu(\infty)$ осциллирующим образом (если условие (2.33) соблюдается). Это интересный и довольно неожиданный результат, так как плотности вероятности времен ожидания не содержат периодических функций. С точки зрения наших предыдущих расчетов такое поведение $\mu(t)$ может быть интерпретировано как возникновение эффектов памяти. Немонотонная зависимость $\mu(t)$ от t , найденная из уравнения (2.35) и с помощью численного моделирования, показана на рисунке 2.2 для различных значений параметров интенсивности λ_{\pm} .

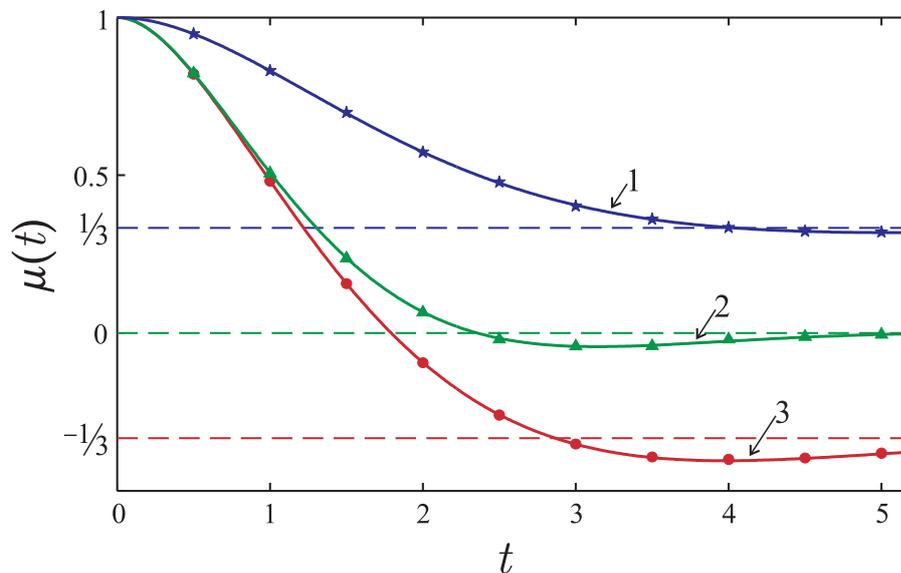


Рисунок 2.2 — Релаксационные законы в случае гамма-распределений времен ожидания для $k = 2$, $\lambda_+ = 0.5$, $\lambda_- = 1$ (1), $\lambda_+ = \lambda_- = 1$ (2) и $\lambda_+ = 1$, $\lambda_- = 0.5$ (3). Сплошная линия показывает теоретический результат (2.35) и маркерами показаны результаты моделирования $\langle f(t) \rangle$. Период T тригонометрических функций равен $8\pi/\sqrt{7}$ и 2π для случаев (1), (3) и (2) соответственно.

Несмещенный случай при $k \geq 2$.

В этом случае $p_s = \lambda^k / (s + \lambda)^k$ и, согласно формуле (2.25), мы находим

$$\mu_s = \frac{1 - (s + \lambda)^k / \lambda^k}{[1 - (s + \lambda) / \lambda][1 + (s + \lambda)^k / \lambda^k]}. \quad (2.36)$$

Последний результат показывает, что $\mu(t) = e^{-\lambda t} g(\lambda t)$, где функция $g(t)$ определяется с помощью ее преобразования Лапласа

$$g_s = \frac{1 - s^k}{(1 - s)(1 + s^k)}. \quad (2.37)$$

Используя соотношение $(1 - s^k)/(1 - s) = \sum_{j=1}^k s^{j-1}$ и $1 + s^k = \prod_{j=1}^k (s - a_j)$ с величинами $a_j = e^{i\pi(2j-1)/k}$, являющимися решениями уравнения $1 + s^k = 0$, мы можем записать предыдущую формулу как

$$g_s = \frac{\sum_{j=1}^k s^{j-1}}{\prod_{j=1}^k (s - a_j)}. \quad (2.38)$$

Тогда, применяя обратное преобразование Лапласа к выражению (2.38) [см. [37], формула 5.2(19)], мы находим

$$g(t) = \sum_{l=1}^k \frac{\sum_{j=1}^k a_l^{j-1}}{\prod_{j=1}^k (a_l - a_j)} e^{a_l t}, \quad (2.39)$$

где штрих в произведении означает, что $j \neq l$. Этот результат, вместе с тем фактом, что $\sum_{j=1}^k a_l^{j-1} = 2/(1 - a_l)$, показывает

$$\mu(t) = 2 \sum_{l=1}^k \frac{e^{-(1-a_l)\lambda t}}{(1 - a_l) \prod_{j=1}^k (a_l - a_j)}. \quad (2.40)$$

Наконец, из $\prod_{j=1}^k (a_l - a_j) = k a_l^{k-1} = -k/a_l$ следует, что релаксационная функция (2.40) может быть представлена в форме

$$\mu(t) = \frac{\theta_k}{k} e^{-2\lambda t} + \frac{2}{k} \sum_{l=1}^{[k/2]} \left[\cos(\beta_l \lambda t) + \frac{\beta_l}{1 - \alpha_l} \sin(\beta_l \lambda t) \right] e^{-(1-\alpha_l)\lambda t}. \quad (2.41)$$

Здесь $\theta_k = 0$ или 1 , если k — четное или нечетное соответственно; $[k/2]$ означает целую часть $k/2$ и

$$\alpha_l = \cos\left(\frac{2\pi l - \pi}{k}\right), \quad \beta_l = \sin\left(\frac{2\pi l - \pi}{k}\right). \quad (2.42)$$

Значит, согласно (2.41), релаксация к предельному значению $[\mu(\infty) = 0]$ также происходит осциллирующим образом. Но, в отличие от релаксационной функции (2.35) с одним периодом осцилляции T , в этой ситуации осциллирующая часть $\mu(t)$ в общем характеризуется несколькими периодами $T_l = 2\pi/(\beta_l\lambda)$ (если $k \geq 5$). Отметим, что аналитический результат (2.41) находится в соответствии с проведенным численным моделированием.

2.2.2 Асимптотические результаты

Нашим следующим шагом является изучение поведения релаксационной функции при больших временах для двух типов систем. Первая из них характеризуется тяжелыми хвостами распределений времен ожидания, а вторая — свехтяжелыми хвостами. Нашей главной задачей здесь будет найти асимптотическое поведение законов релаксации в несмещенном случае, когда $p^\pm(\tau) = p(\tau)$.

Тяжелые плотности $p(\tau)$.

Класс распределений с тяжелыми хвостами времен ожидания характеризуется следующим асимптотическим поведением

$$p(\tau) \sim \frac{q}{\tau^{1+\alpha}} \quad (2.43)$$

($\tau \rightarrow \infty$), где q — положительный параметр и хвостовой индекс α удовлетворяет условию $\alpha \in (0, 2]$. Поскольку поведение $\mu(t)$ при больших значениях времени связано с поведением μ_s при стремлении действительной переменной s к нулю [34, 76], то нам необходимо найти p_s при $s \rightarrow 0$. Используя асимптотическую формулу (2.43), несложно показать (см., напри-

мер, работу [77]), что

$$1 - p_s \sim \begin{cases} q \frac{\Gamma(1-\alpha)}{\alpha} s^\alpha, & \alpha \in (0, 1) \\ qs \ln \frac{1}{s}, & \alpha = 1 \\ \bar{\tau} s - q \frac{\Gamma(2-\alpha)}{\alpha(\alpha-1)} s^\alpha, & \alpha \in (1, 2) \\ \bar{\tau} s - \frac{q}{2} s^2 \ln \frac{1}{s}, & \alpha = 2 \end{cases} \quad (2.44)$$

($s \rightarrow 0$), где $\Gamma(\cdot)$ — гамма-функция и $\bar{\tau} = \int_0^\infty d\tau \tau p(\tau)$. Основываясь на этих результатах, асимптотическое поведение $\mu(t)$ может быть получено из тауберовой теоремы для преобразования Лапласа. Она утверждает [34, 76], что если функция $h(t)$ начиная с некоторого момента будет монотонной и

$$h_s \sim \frac{1}{s^\rho} L\left(\frac{1}{s}\right) \quad (2.45)$$

при $s \rightarrow 0$, то

$$h(t) \sim \frac{1}{\Gamma(\rho)} t^{\rho-1} L(t) \quad (2.46)$$

при $t \rightarrow \infty$. Здесь $\rho > 0$ и $L(t)$ — положительная медленно меняющаяся на бесконечности функция, т.е. такая, что условие $L(\sigma t) \sim L(t)$ ($t \rightarrow \infty$) выполняется для всех $\sigma > 0$.

Если $\alpha \in (0, 1)$, тогда согласно уравнениям (2.25) и (2.44) имеем $\mu_s \sim q\Gamma(1-\alpha)/(2\alpha s^{1-\alpha})$ ($s \rightarrow 0$) и, связывая $h(t)$ с $\mu(t)$, непосредственно из тауберовой теоремы получаем

$$\mu(t) \sim \frac{q}{2\alpha} t^{-\alpha} \quad (2.47)$$

при $t \rightarrow \infty$. Поскольку при $\alpha = 1$ и $s \rightarrow 0$ имеет место соотношение $\mu_s \sim (q/2) \ln(1/s)$, то тауберова теорема не применима к $\mu(t)$. Тем не менее, она может быть использована в отношении функции $h(t) = \int_0^t dt' \mu(t')$, чье преобразование Лапласа дается выражением $h_s = \mu_s/s$. Из этого следует, что $h(t) \sim (q/2) \ln t$ при $t \rightarrow \infty$ и, так как $\mu(t) = dh(t)/dt$, мы убеждаемся, что и случай $\alpha = 1$ также описывается асимптотической формулой

(2.47). Аналогично, вводя вспомогательную функцию $h(t) = \bar{\tau}/2 - \int_0^t dt' \mu(t')$ и используя соотношение $\mu(t) = -dh(t)/dt$, несложно проверить, что эта формула справедлива для $\alpha \in (1, 2]$. Значит, любая двухуровневая система с тяжелыми хвостами распределений времен ожидания в несмещенном случае демонстрирует медленную (степенную) релаксацию (2.47).

Сверхтяжелые плотности $p(\tau)$

И, наконец, рассмотрим класс сверхтяжелых плотностей вероятности времен ожидания. Их асимптотическое поведение задается выражением

$$p(\tau) \sim \frac{1}{\tau} l(\tau) \quad (2.48)$$

($\tau \rightarrow \infty$). Здесь $l(\tau)$ — медленно меняющаяся на бесконечности функция, которая в связи с условием нормировки подчиняется условию $\int_0^\infty d\tau p(\tau) = 1$ и стремится к нулю таким образом, что $l(\tau) = o(1/\ln \tau)$ при $\tau \rightarrow \infty$. Такой класс плотностей вероятности был недавно изучен в связи с явлением сверхмедленной диффузии в контексте STRW формализма [25, 28–30].

Для нахождения поведения релаксационной функции $\mu(t)$ в таких двухуровневых системах мы для начала представим функцию $V(t) = \int_t^\infty d\tau p(\tau)$, которая показывает вероятность того, что время ожидания превысит значение t . Важным аспектом, который следует из формулы (2.48), является то, что $V(t)$ стремится к нулю при $t \rightarrow \infty$ как медленно меняющаяся функция. Этот факт позволяет нам найти асимптотическую формулу для $\mu(t)$. А именно, поскольку $1 - p_s = sV_s$ и $V_s \sim (1/s)V(1/s)$ ($s \rightarrow 0$), то уравнение (2.25) приводит к $\mu_s \sim (1/2s)V(1/s)$. Из этого, на основе тауберовой теоремы, получаем

$$\mu(t) \sim \frac{1}{2} V(t) \quad (2.49)$$

при $t \rightarrow \infty$. Поскольку условие $\lim_{t \rightarrow \infty} t^\rho V(t) = \infty$ сохраняется для всех $\rho > 0$ [78], то $\mu(t)$ убывает медленнее, чем любая отрицательная степень времени. Как следствие, релаксационный процесс с асимптотическим по-

ведением (2.49) может быть назван сверхмедленным. В частности, если

$$p(\tau) = \frac{\ln c}{(c + \tau) \ln^2(c + \tau)} \quad (2.50)$$

($c > 1$), то вероятность $V(t) = \ln c / \ln(c + t)$ и выражение (2.49) дает $\mu(t) \sim \ln c / (2 \ln t)$. Численное моделирование для случая сверхтяжелых плотностей (см. метод в работе [30]) показывает справедливость аналитического результата (2.49).

2.3 Выводы к разделу 2

Используя подход STRW, мы изучили явление релаксации в классе двухуровневых систем, чьи структурные элементы изменяются согласно дихотомическому процессу. Главным образом наш интерес был сосредоточен на плотности вероятности разницы времен пребывания системы в верхнем и нижнем положениях и законе релаксации. Полагая, что распределения времен ожидания для положений дихотомического процесса произвольны, мы нашли преобразование Фурье-Лапласа искомой плотности вероятности и преобразование Лапласа закона релаксации. Эти представления использованы для определения плотности вероятности в случае экспоненциальных распределений времен ожидания, нахождения интегральных уравнений, описывающих смещенную и несмещенную релаксацию, и вычисления релаксационных законов в некоторых частных случаях. Мы рассмотрели распределения Эрланга для времен ожидания и два класса распределений, характеризующихся тяжелыми и сверхтяжелыми хвостами. Показано, что в зависимости от плотностей времен ожидания, двухуровневые системы могут демонстрировать широкий спектр режимов релаксации, включая экспоненциальный, осциллирующий, медленный и сверхмедленный характер поведения. Аналитические результаты подтверждены численным моделированием.

3 ВЛИЯНИЕ ИНДУКЦИОННЫХ ТОКОВ ПРОВОДИМОСТИ НА ДИНАМИКУ НАМАГНИЧЕННОСТИ В ОДНОДОМЕННЫХ НАНОЧАСТИЦАХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ФЕРРОМАГНЕТИКОВ

Хорошо известно, что если размер ферромагнитной частицы меньше критического (верхний предел критического размера имеет порядок 10^2 нм), тогда однородное распределение намагниченности является энергетически выгодным [99]. Такие частицы имеют уникальные физические свойства и обладают высоким потенциалом применения, например, в микроэлектронике [80–82], спинтронике [83, 84] и биомедицине [85–88]. Динамика вектора намагниченности в таких наночастицах хорошо описывается феноменологическим уравнением Ландау-Лифшица-Гильберта (ЛЛГ) [89, 90], в котором влияние внутренних и внешних факторов учитывается с помощью эффективного магнитного поля. В наночастицах проводящих ферромагнетиков эффективное поле содержит также магнитное поле вихревых токов, которые индуцируются переменным во времени внешним магнитным полем и движением намагниченности. Хотя обычно этим полем пренебрегают, его влияние на динамику намагниченности наночастиц, размеры которых близки к критическим, может быть значительным.

Насколько нам известно, количественный анализ этого влияния впервые проведен в работе [91]. Авторы данной работы получили эффективное уравнение ЛЛГ (то есть замкнутое уравнение ЛЛГ, которое описывает динамику намагниченности в наночастицах проводящих ферромагнетиков) в приближении, когда среднее магнитное поле вихревых токов индуцируемых движением намагниченности аппроксимируется его значением в центре наночастицы. Поскольку вихревые токи в наночастице распределены очень неоднородно, такое приближение является достаточно грубым. Что касается вихревых токов индуцируемых внешним полем, их роль даже не обсуждалась.

Таким образом, проблема нахождения эффективного уравнения ЛЛГ для описания динамики намагниченности в однодоменных наночастицах проводящих ферромагнетиков остается открытой. В данной работе указанная проблема полностью решена путем решения уравнений Максвелла в квазистатическом приближении. Найденное эффективное уравнение ЛЛГ

использовано для изучения эффектов прецессионного переключения намагниченности наночастиц и резонансного поглощения магнитной энергии в системах наночастиц, направление легких осей которых распределены равномерно.

3.1 Вывод эффективного уравнения Ландау-Лифшица-Гильберта для металлических наночастиц

3.1.1 Модель и базовые уравнения

В данной работе рассматривается однодоменная ферромагнитная частица радиусом a , которая характеризуется электропроводностью σ и магнитной проницаемостью μ_1 . Также предполагается, что частица электрически нейтральна и встроена в диэлектрическую матрицу, чья магнитная восприимчивость равна μ_2 , а начало декартовых координат находится в центре частицы.

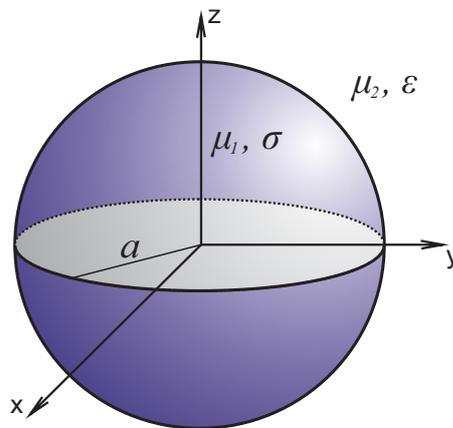


Рисунок 3.1 — Модель сферической однодоменной частицы радиусом a , проводимостью σ и магнитной проницаемостью μ_1 . Частица встроена в диэлектрическую матрицу с магнитной проницаемостью μ_2 и диэлектрической проницаемостью ϵ .

Если обменная энергия между соседними спинами значительно превышает их магнитную энергию, тогда намагниченность частицы $\mathbf{M} = \mathbf{M}(t)$ изменяется со временем таким образом, что $|\mathbf{M}| = M = \text{const}$. В этом случае динамика вектора намагниченности может быть описана уравнением

ЛЛГ [90]

$$\dot{\mathbf{M}} = -\gamma \mathbf{M} \times \mathcal{H}_{\text{eff}} + \frac{\alpha}{M} \mathbf{M} \times \dot{\mathbf{M}}, \quad (3.1)$$

где $\dot{\mathbf{M}} = d\mathbf{M}/dt$, \mathcal{H}_{eff} – суммарное эффективное магнитное поле, которое действует на вектор намагниченности, $\gamma (> 0)$ – гиромагнитное отношение, $\alpha (> 0)$ – параметр затухания Гильберта, а знаком \times обозначается векторное произведение. Поскольку частица является электропроводящей, суммарное эффективное поле удобно представить в виде суммы двух слагаемых: $\mathcal{H}_{\text{eff}} = \mathbf{H}_{\text{eff}} + \bar{\mathbf{H}}$, где $\mathbf{H}_{\text{eff}} = -(1/V)\partial W/\partial \mathbf{M}$ – эффективное магнитное поле при $\sigma = 0$, и $\bar{\mathbf{H}} = (1/V)\int_V \mathbf{H} d\mathbf{r}$ – усредненное (по объему частицы $V = 4\pi a^3/3$) магнитное поле вихревых токов. В частности, если частица является одноосной, тогда

$$\mathbf{H}_{\text{eff}} = \frac{H_a}{M} (\mathbf{M} \cdot \mathbf{e}_a) \mathbf{e}_a + \mathbf{H}_1^{(0)}. \quad (3.2)$$

Здесь H_a – поле магнитной анизотропии, \mathbf{e}_a – единичный вектор, направленный вдоль оси анизотропии, точка между векторами означает скалярное произведение, $\mathbf{H}_1^{(0)}$ – магнитное поле внутри частицы. Решая магнитостатические уравнения для заданной геометрии [92], несложно показать, что

$$\mathbf{H}_1^{(0)} = \kappa \mathbf{H}_0 - \frac{4\pi\kappa}{3\mu_2} \mathbf{M}, \quad (3.3)$$

где

$$\kappa = \frac{3\mu_2}{\mu_1 + 2\mu_2}. \quad (3.4)$$

Первое слагаемое в правой части (3.3) — однородное магнитное поле, которое индуцируется внешним магнитным полем $\mathbf{H}_0 = \mathbf{H}_0(t)$, а второе слагаемое представляет собой поле размагничивания, которое вызывается намагниченностью.

Важной особенностью уравнения (3.1) является его незамкнутость. Это объясняется тем, что магнитное поле $\mathbf{H} = \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ вихревых токов зависит от намагниченности \mathbf{M} . Поэтому в случае, когда частица является

электропроводящей, уравнение (3.1) должно быть дополнено уравнениями Максвелла. В квазистатическом приближении эти уравнения (в системе СГС) могут быть записаны в следующем виде:

$$\nabla \times \mathbf{E}_l = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}_l, \quad \nabla \cdot \mathbf{E}_l = 0, \quad (3.5a)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}_l = \frac{4\pi\sigma_l}{c} \mathbf{E}_l, \quad \nabla \cdot \mathbf{H}_l = 0. \quad (3.5b)$$

Здесь $\mathbf{E}_l = \mathbf{E}_l(\mathbf{r}, t)$ – индуцируемое электрическое поле, индексы $l = 1$ и $l = 2$ обозначают соответствующие величины внутри ($r = |\mathbf{r}| < a$) и вне ($r > a$) частицы, $\sigma_l = \sigma\delta_{1l}$, δ_{1l} – дельта Кронекера, c – скорость света в вакууме, $\nabla \times$ – ротор, $\nabla \cdot$ – дивергенция, $\mathbf{B}_l = \mathbf{B}_l(\mathbf{r}, t)$ – магнитная индукция. Согласно ВаТо, в магнитостатическом приближении $\mathbf{B}_1 = \mu_1 \mathbf{H}_1^{(0)} + 4\pi \mathbf{M}$ и $\mathbf{B}_2 = \mu_2 \mathbf{H}_2^{(0)}$, где

$$\mathbf{H}_2^{(0)} = \mathbf{H}_0 - \frac{\mathbf{m}^{(0)}}{r^3} + \frac{3(\mathbf{m}^{(0)} \cdot \mathbf{r})\mathbf{r}}{r^5} \quad (3.6)$$

представляет магнитное поле вне частицы, а

$$\mathbf{m}^{(0)} = \frac{a^3 \kappa}{3\mu_2} [(\mu_1 - \mu_2)\mathbf{H}_0 + 4\pi \mathbf{M}] \quad (3.7)$$

– магнитный момент частицы, вызванный внешним магнитным полем и намагниченностью. Отметим также, что тангенциальные и нормальные компоненты векторов \mathbf{E}_l и \mathbf{H}_l (обозначаемые индексами τ и n соответственно) должны удовлетворять следующим граничным условиям:

$$\mathbf{E}_{1\tau} = \mathbf{E}_{2\tau}, \quad E_{2n} = 0, \quad (3.8a)$$

$$\mathbf{H}_{1\tau} = \mathbf{H}_{2\tau}, \quad \mu_1 H_{1n} = \mu_2 H_{2n}. \quad (3.8b)$$

3.1.2 Решение уравнений Максвелла для индукционного электрического поля

Согласно (3.3) магнитная индукция \mathbf{B}_1 в магнитостатическом приближении имеет следующий вид:

$$\mathbf{B}_1 = \kappa \left(\mu_1 \mathbf{H}_0 + \frac{8\pi}{3} \mathbf{M} \right). \quad (3.9)$$

Так как \mathbf{B}_1 не зависит от \mathbf{r} , электрическое поле \mathbf{E}_1 можно представить в виде $\mathbf{E}_1 = \mathbf{a}(t) \times \mathbf{r}$. Используя первое уравнение в (3.5а), получим

$$\mathbf{E}_1 = -\frac{\kappa}{2c} \left(\mu_1 \dot{\mathbf{H}}_0 + \frac{8\pi}{3} \dot{\mathbf{M}} \right) \times \mathbf{r}. \quad (3.10)$$

Именно это электрическое поле порождает вихревые токи плотностью $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}_1$ внутри частицы.

Аналогично, используя уравнения (3.6) и (3.7), для магнитной индукции вокруг частицы находим

$$\mathbf{B}_2 = \mu_2 \mathbf{H}_0 - \frac{(\mu_1 - \mu_2)\kappa V}{4\pi r^5} [r^2 \mathbf{H}_0 - 3(\mathbf{H}_0 \cdot \mathbf{r})\mathbf{r}] - \frac{\kappa V}{r^5} [r^2 \mathbf{M} - 3(\mathbf{M} \cdot \mathbf{r})\mathbf{r}] \quad (3.11)$$

В соответствии с этой формулой индуцируемое электрическое поле можно искать в виде

$$\mathbf{E}_2 = [u(r)\dot{\mathbf{H}}_0 + v(r)\dot{\mathbf{M}}] \times \mathbf{r}, \quad (3.12)$$

где функции $u(r)$ и $v(r)$ подлежат определению. Принимая во внимание, что

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{E}_2 = & [ru'(r) + 2u(r)]\dot{\mathbf{H}}_0 - \frac{u'(r)}{r}(\dot{\mathbf{H}}_0 \cdot \mathbf{r})\mathbf{r} \\ & + [rv'(r) + 2v(r)]\dot{\mathbf{M}} - \frac{v'(r)}{r}(\dot{\mathbf{M}} \cdot \mathbf{r})\mathbf{r} \end{aligned} \quad (3.13)$$

и $\nabla \times \mathbf{E}_2 = -(1/c)\dot{\mathbf{B}}_2$, с помощью (3.11) находим уравнения для $u(r)$

$$\begin{aligned} ru'(r) + 2u(r) &= -\frac{\mu_2}{c} + \frac{(\mu_1 - \mu_2)\kappa V}{4\pi cr^3}, \\ u'(r) &= \frac{3(\mu_1 - \mu_2)\kappa V}{4\pi cr^4} \end{aligned} \quad (3.14)$$

и для $v(r)$

$$rv'(r) + 2v(r) = \frac{\kappa V}{cr^3}, \quad v'(r) = \frac{3\kappa V}{cr^4} \quad (3.15)$$

(штрих означает производную по r). Подставив в (3.12) функции

$$u(r) = -\frac{\mu_2}{2c} - \frac{(\mu_1 - \mu_2)\kappa V}{4\pi cr^3}, \quad v(r) = -\frac{\kappa V}{cr^3}, \quad (3.16)$$

которые являются решениями уравнений (3.14) и (3.15), находим индуцированное электрическое поле вокруг частицы

$$\mathbf{E}_2 = -\frac{\kappa}{2c} \left[\left(\frac{\mu_2}{\kappa} + \frac{(\mu_1 - \mu_2)V}{2\pi r^3} \right) \dot{\mathbf{H}}_0 + \frac{2V}{r^3} \dot{\mathbf{M}} \right] \times \mathbf{r}. \quad (3.17)$$

Отметим также, что согласно (3.10) и (3.17) граничные условия (3.8а) выполняются автоматически.

3.1.3 Решение уравнений Максвелла для магнитного поля индукционных токов

Согласно уравнениям (3.5а) и (3.10) магнитное поле вихревых токов можно искать в виде

$$\mathbf{H}_l = f_l(r)\dot{\mathbf{H}}_0 + g_l(r)(\dot{\mathbf{H}}_0 \cdot \mathbf{r})\mathbf{r} + p_l(r)\dot{\mathbf{M}} + q_l(r)(\dot{\mathbf{M}} \cdot \mathbf{r})\mathbf{r}, \quad (3.18)$$

где функции $f_l(r)$, $g_l(r)$, $p_l(r)$ и $q_l(r)$ подлежат определению. Поскольку в этом случае

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{H}_l &= -[f'_l(r)/r - g_l(r)]\dot{\mathbf{H}}_0 \times \mathbf{r} \\ &\quad -[p'_l(r)/r - q_l(r)]\dot{\mathbf{M}} \times \mathbf{r} \end{aligned} \quad (3.19)$$

и

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{H}_l = & [f'_l(r)/r + rg'_l(r) + 4g_l(r)]\dot{\mathbf{H}}_0 \cdot \mathbf{r} \\ & + [p'_l(r)/r + rq'_l(r) + 4q_l(r)]\dot{\mathbf{M}} \cdot \mathbf{r}, \end{aligned} \quad (3.20)$$

с первого уравнения в (3.5а) находим

$$\begin{aligned} f'_l(r) - rg_l(r) &= \frac{2\pi\sigma\kappa\mu_1}{c^2}r\delta_{1l}, \\ p'_l(r) - rq_l(r) &= \frac{16\pi^2\sigma\kappa}{3c^2}r\delta_{1l} \end{aligned} \quad (3.21)$$

а со второго

$$\begin{aligned} f'_l(r) + r^2g'_l(r) + 4rg_l(r) &= 0, \\ p'_l(r) + r^2q'_l(r) + 4rq_l(r) &= 0. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Принимая во внимание, что $|\mathbf{H}_1| < \infty$, из уравнений (3.21) и (3.22) при $l = 1$ получаем

$$\begin{aligned} f_1(r) = \phi - 2r^2g_1(r), \quad g_1(r) &= -\frac{3\tau_\sigma}{2\kappa a^2}, \\ p_1(r) = \psi - 2r^2q_1(r), \quad q_1(r) &= -\frac{4\pi\tau_\sigma}{\kappa\mu_1 a^2}, \end{aligned} \quad (3.23)$$

где ϕ и ψ – константы интегрирования и

$$\tau_\sigma = \frac{4\pi\sigma\kappa^2 a^2 \mu_1}{15c^2} \quad (3.24)$$

– характерный масштаб времени. Аналогично, используя условие $|\mathbf{H}_2| \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$, уравнения (3.21) и (3.22) при $l = 2$ дают

$$\begin{aligned} f_2(r) = -\frac{\nu}{3r^3}, \quad g_2(r) &= \frac{\nu}{r^5}, \\ p_2(r) = -\frac{\epsilon}{3r^3}, \quad q_2(r) &= \frac{\epsilon}{r^5}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Константы интегрирования ϕ , ψ , ν и ϵ можна найти из граничных

условий (3.8b). Действительно, учитывая соотношения $\mathbf{H}_{1,2\tau} = \mathbf{e}_n \times (\mathbf{H}_{1,2} \times \mathbf{e}_n)|_{r=a}$ и $H_{1,2n} = \mathbf{H}_{1,2} \cdot \mathbf{e}_n|_{r=a}$ ($\mathbf{e}_n = \mathbf{r}/r$), эти граничные условия можно привести к виду

$$\begin{aligned} \phi + \frac{\nu}{3a^3} &= -\frac{3\tau_\sigma}{\kappa}, & \psi + \frac{\epsilon}{3a^3} &= -\frac{4\pi\tau_\sigma}{\kappa\mu_1}, \\ \phi - \frac{2\mu_2\nu}{3\mu_1a^3} &= -\frac{3\tau_\sigma}{2\kappa}, & \psi - \frac{2\mu_2\epsilon}{3\mu_1a^3} &= -\frac{4\pi\tau_\sigma}{\kappa\mu_1}, \end{aligned} \quad (3.26)$$

откуда находим

$$\begin{aligned} \phi &= -\left(1 + \frac{3}{2\kappa}\right)\tau_\sigma, & \nu &= -\frac{3\mu_1}{2\mu_2}a^3\tau_\sigma, \\ \psi &= -\frac{8\pi}{3\mu_1}\left(1 + \frac{3}{2\kappa}\right)\tau_\sigma, & \epsilon &= -\frac{4\pi}{\mu_2}a^3\tau_\sigma. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Таким образом, на основании полученных выше результатов находим магнитное поле вихревых токов внутри частицы

$$\mathbf{H}_1 = \frac{\mu_2}{\kappa\mu_1} \left[\left(3 + 2\kappa - 6\frac{r^2}{a^2}\right) \frac{\mathbf{m}}{a^3} + \frac{3}{a^5}(\mathbf{m} \cdot \mathbf{r})\mathbf{r} \right] \quad (3.28)$$

и вне частицы

$$\mathbf{H}_2 = -\frac{\mathbf{m}}{r^3} + \frac{3}{r^5}(\mathbf{m} \cdot \mathbf{r})\mathbf{r}, \quad (3.29)$$

где

$$\mathbf{m} = -\frac{a^3\tau_\sigma}{2\mu_2} \left(\mu_1 \dot{\mathbf{H}}_0 + \frac{8\pi}{3} \dot{\mathbf{M}} \right) \quad (3.30)$$

— магнитный момент частицы, порожденный вихревыми токами. В качестве иллюстрации на Рис. 3.2 показаны силовые линии индукционного электрического поля и силовые линии магнитного поля вихревых токов.

3.1.4 Эффективное уравнение Ландау-Лифшица-Гильберта

Наконец, используя формулу (3.28), можно рассчитать усредненное магнитное поле вихревых токов, $\bar{\mathbf{H}} = (1/V) \int_V \mathbf{H}_1 d\mathbf{r}$, входящее в суммар-

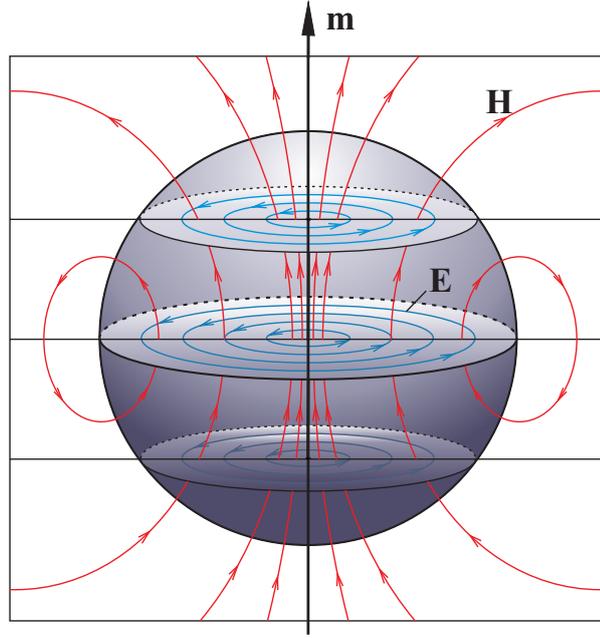


Рисунок 3.2 – Силовые линии электрического и магнитного полей при $\mu_1 = \mu_2 = 1$. Поскольку в соответствии с (3.10) и (3.30) $\mathbf{E}_1 = (\kappa\mu_2/ca^3\tau_\sigma)\mathbf{m} \times \mathbf{r}$, силовые линии индукционного электрического поля циркулярны и лежат в плоскостях, перпендикулярных вектору \mathbf{m} . Силовые линии магнитного поля вихревых токов \mathbf{H} , которые показаны только в плоскости рисунка, определяются формулами (3.28) и (3.29).

ное эффективное поле \mathcal{H}_{eff} . Принимая во внимание, что

$$\frac{1}{V} \int_V r^2 d\mathbf{r} = \frac{3a^2}{5}, \quad \frac{1}{V} \int_V (\mathbf{m} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{r} d\mathbf{r} = \frac{a^2}{5} \mathbf{m},$$

получим $\bar{\mathbf{N}} = (2\mu_2/\mu_1 a^3)\mathbf{m}$ и, учитывая (3.30),

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \mathbf{H}_{\text{eff}} - \tau_\sigma \dot{\mathbf{H}}_0 - \frac{8\pi\tau_\sigma}{3\mu_1} \dot{\mathbf{M}}. \quad (3.31)$$

Отсюда, подставив (3.31) в (3.1), находим эффективное уравнение ЛЛГ [93, 94]

$$\dot{\mathbf{M}} = -\gamma \mathbf{M} \times (\mathbf{H}_{\text{eff}} - \tau_\sigma \dot{\mathbf{H}}_0) + \frac{\alpha + \alpha_\sigma}{M} \mathbf{M} \times \dot{\mathbf{M}}, \quad (3.32)$$

где

$$\alpha_\sigma = \frac{8\pi\gamma M \tau_\sigma}{3\mu_1}. \quad (3.33)$$

Таким образом, динамика намагниченности в наночастицах проводящих ферромагнетиков может быть описана замкнутым уравнением ЛЛГ (3.32). В этом уравнении эффекты, обусловленные проводимостью частицы описываются двумя слагаемыми. Первое, $-\tau_\sigma \dot{\mathbf{H}}_0$, может рассматриваться как дополнительное внешнее магнитное поле, а второе, α_σ , — как дополнительный параметр затухания. Оба эти слагаемые появляются вследствие протекания вихревых токов внутри частицы. Отметим также, что первое слагаемое, которым в большинстве случаев можно пренебречь, обусловлено вихревыми токами, вызванными изменением внешнего магнитного поля, а второе слагаемое обусловлено вихревыми токами, вызванными изменением направления вектора намагниченности частицы.

3.2 Влияние индукционных электрических токов на магнитные свойства наночастиц

В этом разделе необходимость учета проводимости наночастиц и действенность эффективного уравнения ЛЛГ (3.32) продемонстрированы на примере двух динамических эффектов. Первый заключается в прецессионном переключении намагниченности (изменении направления намагниченности на противоположный) в одноосных наночастицах под действием импульса магнитного поля, величина которого значительно меньше поля анизотропии. Второй заключается в резонансной зависимости поглощенной энергии от частоты переменного магнитного поля в системах наночастиц с равномерным распределением направлений их осей легкого намагничивания.

3.2.1 Прецессионное переключение намагниченности в металлических наночастицах

В случае, когда ось анизотропии направлена вдоль оси z , $\mathbf{e}_a = \mathbf{e}_z$, а импульс внешнего магнитного поля — вдоль оси x , $\mathbf{H}_0 = H_0(t)\mathbf{e}_x$, для эффективного магнитного поля, действующего на намагниченность частицы,

получаем

$$\mathbf{H}_{\text{eff}} = \frac{H_a}{M} (\mathbf{M} \cdot \mathbf{e}_z) \mathbf{e}_z + H_0(t) \mathbf{e}_x, \quad (3.34)$$

где

$$H_0(t) = H_{\text{imp}} \begin{cases} t/\tau_1, & 0 \leq t < \tau_2 \\ 1, & \tau_1 \leq t < \tau_1 + \tau_2 \\ (\tau - t)/\tau_3, & \tau_1 + \tau_2 \leq t < \tau \\ 0, & t > \tau = \tau_1 + \tau_2 + \tau_3 \end{cases} \quad (3.35)$$

— импульсное магнитное поле. Далее, вводя безразмерные величины $\tilde{\mathbf{M}} = \mathbf{M}/M$ ($|\tilde{\mathbf{M}}| = 1$, $\tilde{M}_z = \mathbf{M} \cdot \mathbf{e}_z$), $\tilde{h} = H_0/H_a$, $\tilde{h}_{\text{imp}} = H_{\text{imp}}/H_a$, $\tilde{t} = \gamma H_a t$, $\tilde{\tau}_\sigma = \gamma H_a \tau_\sigma$ и $\tilde{\tau}_n = \gamma H_a \tau_n$ ($n = 1, 2, 3$), эффективное уравнение ЛЛГ (3.32) перепишем в виде

$$\frac{d}{d\tilde{t}} \tilde{\mathbf{M}} = -\tilde{\mathbf{M}} \times \left[\tilde{M}_z \mathbf{e}_z + \left(\tilde{h} - \tilde{\tau}_\sigma \frac{d}{d\tilde{t}} \tilde{h} \right) \mathbf{e}_x \right] + (\alpha + \alpha_\sigma) \tilde{\mathbf{M}} \times \frac{d}{d\tilde{t}} \tilde{\mathbf{M}}. \quad (3.36)$$

Для наглядности зависимость безразмерного импульсного магнитного поля \tilde{h} от безразмерного времени \tilde{t} показана на Рис. 3.3.

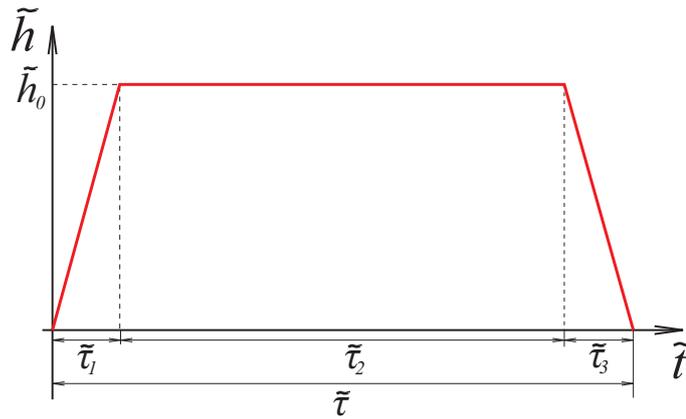


Рисунок 3.3 — Схематическое изображение зависимости импульса безразмерного магнитного поля \tilde{h} от безразмерного времени \tilde{t} ($\tilde{h}_0 = \tilde{h}_{\text{imp}}$).

Уравнение (3.36) решено численно методом Рунге-Кутты четвертого порядка. Параметры, используемые в расчетах, приведены в Таблице 1. Для

Название	Обозначение	Значение
Электропроводность частицы	σ	10^{18} с^{-1}
Магнитная проницаемость частицы	μ_1	1
Магнитная проницаемость внешней среды	μ_2	1
Радиус частицы	a	10^{-5} см
Параметр затухания Гильберта	α	0.01
Скорость света в вакууме	c	$3 \cdot 10^{10} \text{ см с}^{-1}$
Гиромагнитное отношение	γ	$1.76 \cdot 10^7 \text{ с}^{-1} \text{ Э}^{-1}$
Намагниченность $4\pi M$	$4\pi M$	$2 \cdot 10^4 \text{ Гс}$
Поле магнитной анизотропии	H_a	$5 \cdot 10^4 \text{ Э}$

Таблица 1 – Численные значения параметров, используемых для численного решения уравнения ЛЛГ (3.36).

этих параметров из (3.24) и (3.33) находим $\tilde{\tau}_\sigma = 0.08$ ($\tau_\sigma = 9.31 \cdot 10^{-14}$ с) и $\alpha_\sigma = 0.02$. Принимаем также, что $\tilde{\tau}_1 = \tilde{\tau}_3 = 0.01$, а в начальный момент времени $\tilde{\mathbf{M}}(0) = (0, 0, 1)$. Согласно [95–97], под действием такого импульса может произойти прецессионное переключение намагниченности наночастицы. В качестве иллюстрации на Рис. 3.4 показаны характерные траектории движения намагниченности при отсутствии (а) и при наличии (б) переключения.

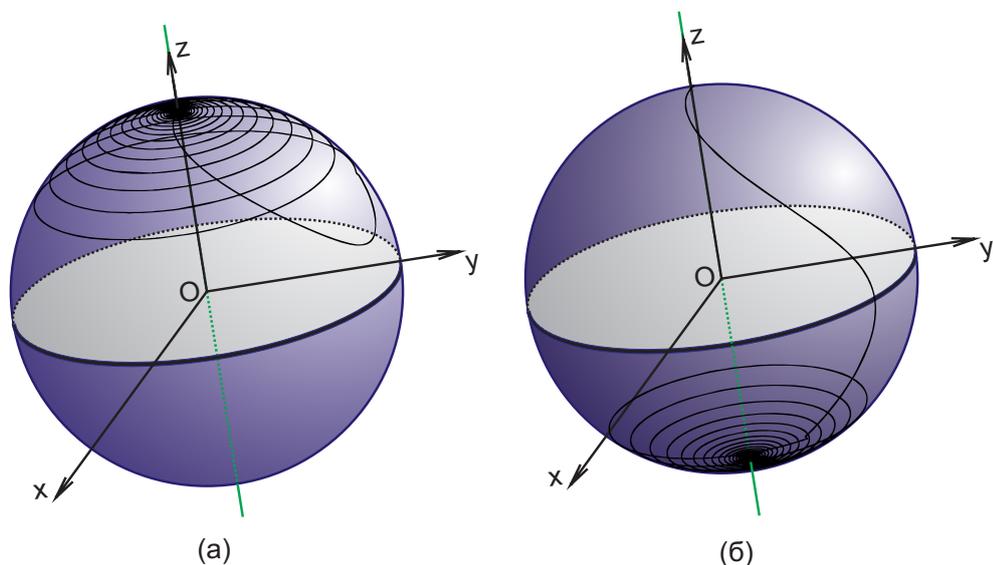


Рисунок 3.4 – Траектории движения намагниченности при отсутствии (а) и при наличии (б) переключения. В первом случае $\tilde{\mathbf{M}}(\infty) = \tilde{\mathbf{M}}(0)$, а во втором $\tilde{\mathbf{M}}(\infty) = -\tilde{\mathbf{M}}(0)$. Длительность импульса $\tilde{\tau} = 10$, а его амплитуда $\tilde{h}_{imp} = 0.5$ (а) и $\tilde{h}_{imp} = 0.55$ (б).

Проведенный анализ показал, что существует такое минимальное значение амплитуды импульса, $\min\{\tilde{h}_{imp}\}$, что при $\tilde{h}_{imp} < \min\{\tilde{h}_{imp}\}$ переключение намагниченности невозможно при любых $\tilde{\tau}$. Если же $\tilde{h}_{imp} > \min\{\tilde{h}_{imp}\}$, тогда переключение возможно только при $\tilde{\tau} > \min\{\tilde{\tau}\}$, где $\min\{\tilde{\tau}\}$ зависит от \tilde{h}_{imp} . Условия $\tilde{h}_{imp} > \min\{\tilde{h}_{imp}\}$ и $\tilde{\tau} > \min\{\tilde{\tau}\}$ необходимы, но не достаточны для переключения, поскольку конечное состояние намагниченности, $(0, 0, 1)$ или $(0, 0, -1)$, зависит от величины \tilde{M}_z в момент окончания импульса, то есть при $\tilde{t} = \tilde{\tau}$. Диаграммы переключения намагниченности в плоскости параметров \tilde{h}_{imp} и $\tilde{\tau}$ показаны на Рис. 3.5 для диэлектрических ($\sigma = 0$) и металлических ($\sigma = 10^{18} \text{ с}^{-1}$) наночастиц с одинаковыми другими параметрами, приведенными в Таблице 1. Из этого рисунка хорошо видно, что вихревые токи могут качественно изменить диаграмму переключения и, таким образом, проводимость наночастиц необходимо учитывать для корректного описания явления прецессионного переключения намагниченности. Отметим также, что хотя влияние безразмерного дополнительного магнитного поля $\tilde{\tau}_\sigma(d\tilde{h}/d\tilde{t})\mathbf{e}_x$ на процесс переключения растет с уменьшением $\tilde{\tau}_1$ и $\tilde{\tau}_3$, главную роль в качественном изменении диаграммы переключения играет дополнительный параметр затухания Гильберта α_σ электродинамического происхождения.

3.2.2 Влияние проводимости на энергию диссипации в системах наночастиц с равномерным распределением направлений их осей легкого намагничивания

Используя определение эффективного магнитного поля, мощность энергетических потерь в одной наночастице, $q = -dW/dt$, то есть энергию диссипации в единицу времени, можно определить по формуле $q = V\mathbf{H}_{\text{eff}} \cdot \dot{\mathbf{M}}$. В соответствии с этим энергия Q , диссипируемая в единицу времени в единице объема системы невзаимодействующих наночастиц (удельная мощность диссипации), записывается как $Q = n\langle q \rangle$, где n — концентрация наночастиц, а угловые скобки обозначают усреднение по ориентациям легких осей. Поскольку согласно эффективному уравнению ЛЛГ (3.32) имеет место простое соотношение $\mathbf{H}_{\text{eff}} \cdot \dot{\mathbf{M}} = [(\alpha + \alpha_\sigma)/\gamma M] \dot{\mathbf{M}}^2$ (мы прене-

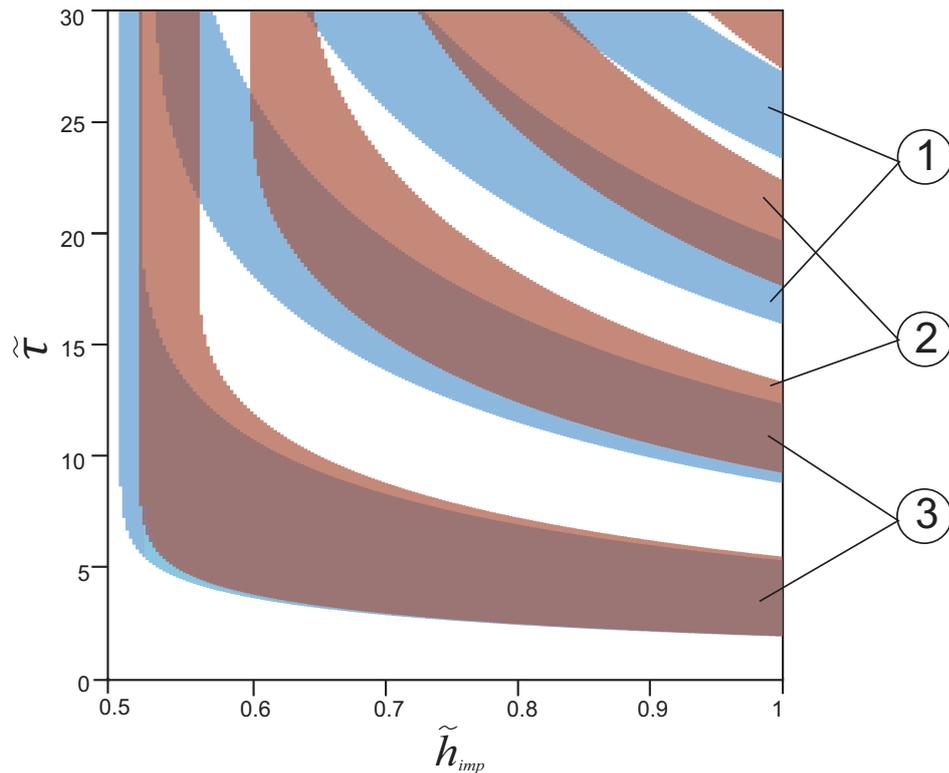


Рисунок 3.5 — Диаграммы переключения намагниченности для диэлектрических (области 1 и 3 голубого и темно-коричневого цветов) и проводящих (области 2 и 3 светло- и темно-коричневого цветов) наночастиц. В областях 3 переключения существует как для диэлектрических, так и для проводящих наночастиц.

брегаем дополнительным магнитным полем $-\tau_\sigma \dot{\mathbf{H}}_0$), для удельной мощности диссипации получаем следующее выражение:

$$Q = \frac{(\alpha + \alpha_\sigma)nV}{\gamma M} \langle \dot{\mathbf{M}}^2 \rangle \quad (3.37)$$

Наша цель заключается в том, чтобы найти Q в случае систем одноосных наночастиц, находящихся под действием внешнего циркулярно-поляризованного магнитного поля

$$\mathbf{H}_0 = h \cos(\omega t) \mathbf{e}_x + h \sin(\omega t) \mathbf{e}_y, \quad (3.38)$$

и проанализировать влияние вихревых токов на зависимость Q от амплитуды h и частоты ω этого поля. В рассматриваемом случае эффективное

магнитное поле в уравнении ЛЛГ (3.32) имеет вид

$$\mathbf{H}_{\text{eff}} = \frac{H_a}{M}(\mathbf{M} \cdot \mathbf{e}_a)\mathbf{e}_a + \mathbf{H}_0 \quad (3.39)$$

а направление единичного вектора \mathbf{e}_a считается случайным и равномерно распределенным. Поэтому, представив \mathbf{e}_a как

$$\mathbf{e}_a = \sin \theta_0 \cos \varphi_0 \mathbf{e}_x + \sin \theta_0 \sin \varphi_0 \mathbf{e}_y + \cos \theta_0 \mathbf{e}_z \quad (3.40)$$

(θ_0 и φ_0 – полярный и азимутальных углы вектора \mathbf{e}_a), среднее значение от $\dot{\mathbf{M}}^2$ можно определить по формуле

$$\langle \dot{\mathbf{M}}^2 \rangle = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_0 \int_0^\pi d\theta_0 \sin \theta_0 \dot{\mathbf{M}}^2 \quad (3.41)$$

Согласно (3.37), для нахождения энергии диссипации необходимо решить уравнение ЛЛГ (3.32). Ниже это будет сделано аналитически в случае малой амплитуды внешнего поля (при $h \ll H_a$) и численно в общем случае произвольных h . В первом случае решение уравнения (3.32) для наночастицы с произвольным направлением легкой оси можно искать в виде (см. Рис. 3.6)

$$\mathbf{M} = M\mathbf{e}_a + \mathbf{m}(|\mathbf{m}| \ll M). \quad (3.42)$$

Поскольку в линейном приближении по \mathbf{m} из условия $\mathbf{M}^2 = M^2$ следует условие $\mathbf{m} \cdot \mathbf{e}_a$ (то есть $\mathbf{m} \perp \mathbf{e}_a$), уравнение ЛЛГ для вектора \mathbf{m} удобно записать в системе координат $x'y'z'$, ось z' которой направлена вдоль \mathbf{e}_a . В этой системе координат $m_{z'} = 0$, а уравнение для $m_{x'}$ и $m_{y'}$ можно записать следующим образом:

$$\dot{m}_{x'} + (\alpha + \alpha_\sigma)\dot{m}_{y'} + \gamma H_a m_{y'} = -\gamma M h \sin(\varphi_0 - \omega t), \quad (3.43a)$$

$$\dot{m}_{y'} - (\alpha + \alpha_\sigma)\dot{m}_{x'} - \gamma H_a m_{x'} = -\gamma M h \cos \theta_0 \cos(\varphi_0 - \omega t). \quad (3.43b)$$

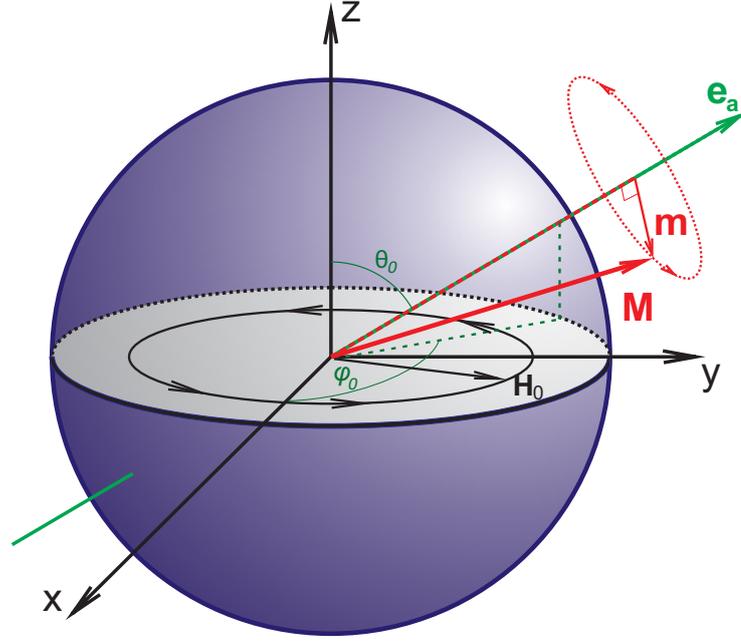


Рисунок 3.6 — Геометрия задачи. Направление легкой оси намагничивания характеризуется полярным θ_0 и азимутальным φ_0 углами, а циркулярно-поляризованное магнитное поле \mathbf{H}_0 лежит в плоскости xy прямоугольной системы координат xyz .

Устоявшееся решение системы уравнений (3.43) будем искать в виде

$$m_{x'} = a \sin(\varphi_0 - \omega t) + b \cos(\varphi_0 - \omega t), \quad (3.44a)$$

$$m_{y'} = c \sin(\varphi_0 - \omega t) + d \cos(\varphi_0 - \omega t). \quad (3.44b)$$

Подставив (3.44) в (3.43), нетрудно получить и решить систему уравнений относительно параметров a, b, c и d :

$$a = -\frac{\gamma M \alpha \omega h [\omega_r^2 \cos \theta_0 + 2\omega_r \omega + \omega^2(1 + \alpha^2) \cos \theta_0]}{\omega_r^4 - 2\omega_r^2 \omega^2(1 - \alpha^2) - \omega^4(1 + \alpha^2)^2}, \quad (3.45a)$$

$$b = \frac{\gamma M h [\omega_r^3 \cos \theta_0 + \omega_r^2 \omega - \omega^2(1 - \alpha^2) \cos \theta_0 - \omega^3(1 + \alpha^2)]}{\omega_r^4 - 2\omega_r^2 \omega^2(1 - \alpha^2) - \omega^4(1 + \alpha^2)^2}, \quad (3.45b)$$

$$c = -\frac{\gamma M h [\omega_r^3 + \omega_r^2 \omega \cos \theta_0 - \omega^2(1 - \alpha^2) - \omega^3(1 + \alpha^2) \cos \theta_0]}{\omega_r^4 - 2\omega_r^2 \omega^2(1 - \alpha^2) - \omega^4(1 + \alpha^2)^2}, \quad (3.45c)$$

$$d = -\frac{\gamma M \alpha \omega h [\omega_r^2 + 2\omega_r \omega \cos \theta_0 + \omega^2(1 + \alpha^2)]}{\omega_r^4 - 2\omega_r^2 \omega^2(1 - \alpha^2) - \omega^4(1 + \alpha^2)^2}, \quad (3.45d)$$

где $\omega_r = \gamma H_a$ — частота ферромагнитного резонанса.

Принимая во внимание, что согласно (3.44) имеет место соотношение

$$\dot{\mathbf{M}}^2 = \omega^2 [(a^2 + c^2) \cos^2(\varphi_0 - \omega t) + (b^2 + d^2) \sin^2(\varphi_0 - \omega t) - (ab + cd) \sin(2\varphi_0 - 2\omega t)] \quad (3.46)$$

из выражения (3.41) получаем

$$\langle \dot{\mathbf{M}}^2 \rangle = \frac{\omega^2}{4} \int_0^\pi (a^2 + b^2 + c^2 + d^2) d\theta_0. \quad (3.47)$$

Отсюда, воспользовавшись выражениями (3.45) и (3.37), находим удельную мощность диссипации в системе хаотически ориентированных наночастиц

$$Q = \frac{2}{3} \tilde{\alpha} \gamma M n V h^2 \frac{(1 + \tilde{\alpha}^2) \omega^4 + \omega_r^2 \omega^2}{(1 + \tilde{\alpha}^2)^2 \omega^4 - 2(1 - \tilde{\alpha}^2)^2 \omega_r^2 \omega^2 + \omega_r^4}, \quad (3.48)$$

где $\tilde{\alpha} = \alpha + \alpha_\sigma$. Наконец, вводя безразмерную частоту поля $\tilde{\omega} = \omega/\omega_r$ и безразмерную удельную мощность диссипации $\tilde{Q} = Q/(2\gamma M n V h^2/3)$, находим

$$\tilde{Q} = \tilde{\alpha} \frac{(1 + \tilde{\alpha}^2) \tilde{\omega}^4 + \tilde{\omega}^2}{(1 + \tilde{\alpha}^2)^2 \tilde{\omega}^4 - 2(1 - \tilde{\alpha}^2)^2 \tilde{\omega}^2 + 1}. \quad (3.49)$$

Отметим, что если $\tilde{\alpha} \ll 1$, тогда $\max\{Q\} = Q|_{\tilde{\omega}=1} = 1/(2\tilde{\alpha})$.

Для проверки теоретического результата (3.49) эффективное уравнение ЛЛГ (3.32) было решено численно при условии, что $\varphi_0 = 0$, а угол θ_0 равен одному из углов $\theta_0^{(i)}$ ($i = \overline{1, N}$), равномерно распределенных в интервале $(0, \pi)$. Рассчитывая $\langle \dot{\mathbf{M}}^2 \rangle$ по формуле $\langle \dot{\mathbf{M}}^2 \rangle = (1/N) \sum_{i=1}^N \dot{\mathbf{M}}^2|_{\theta_0=\theta_0^{(i)}}$ (используются параметры из Таблицы 1, а также $\tilde{h} = h/H_a = 10^{-3}$ и $N = 10^2$), были найдены значения \tilde{Q} для разных $\tilde{\omega}$. Как видно из Рис. 3.7, формула (3.49) полностью согласуются с численными данными. С ростом безразмерной амплитуды поля \tilde{h} в динамике намагниченности начинают проявляться нелинейные эффекты и, как следствие, зависимость \tilde{Q} от $\tilde{\omega}$ может существенно измениться (напомним, что формула (3.49) не зависит от \tilde{h}). Для иллюстрации на Рис. 3.8 показана такая зависимость при $\tilde{h} = 0.3$. Дополнительные локальные максимумы, расположенные в окрест-

ности безразмерных частот $1/n$ (на этом рисунке $n = 2, 3$ и 4), появляются в результате параметрического резонанса вынужденной прецессии намагниченности. Сравнивая на этих рисунках зависимости \tilde{Q} от $\tilde{\omega}$ для диэлектрических и металлических наночастиц, можно сделать вывод, что вихревые токи в металлических наночастицах существенно влияют на их свойства.

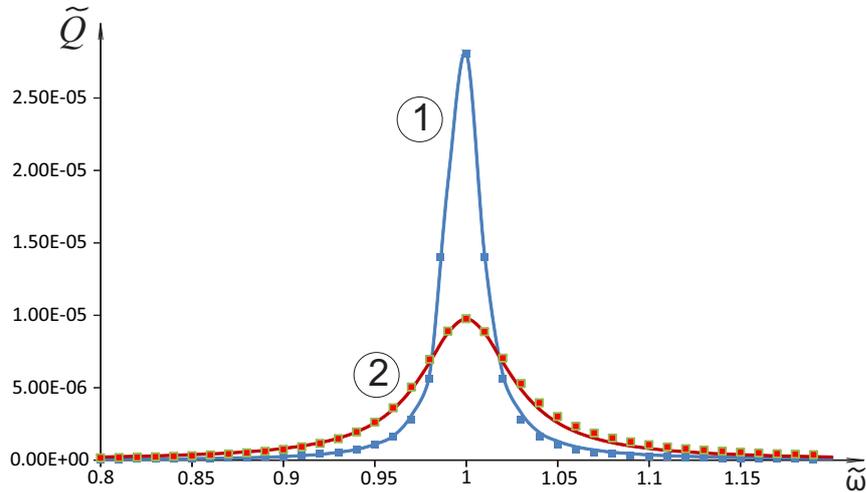


Рисунок 3.7 — Зависимость безразмерной удельной мощности диссипации \tilde{Q} от безразмерной частоты $\tilde{\omega}$ циркулярно-поляризованного магнитного поля для системы диэлектрических (1) и металлических (2) наночастиц при $\tilde{h} = 10^{-3}$. Сплошные линии соответствуют теоретическому результату (3.49), а символы — численным результатам.

3.3 Выводы к разделу 3

В данной работе разработана теоретическая модель для описания динамики намагниченности в наночастицах металлических ферромагнетиков. Модель базируется на совместном решении системы уравнений Максвелла для электромагнитных полей, индуцируемых внешним переменным магнитным полем и движением намагниченности, и уравнения Ландау-Лифшица-Гильберта (ЛЛГ) для намагниченности, в котором эффективное магнитное поле содержит усредненное по объему частицы магнитное поле вихревых токов. Усредненное поле найдено путем решения уравнений Максвелла в квазистатическом приближении, и с его помощью выведено замкнутое эффективное уравнение ЛЛГ, описывающее динамику намагниченности в однодоменных наночастицах металлических ферромагнетиков. В рамках этого

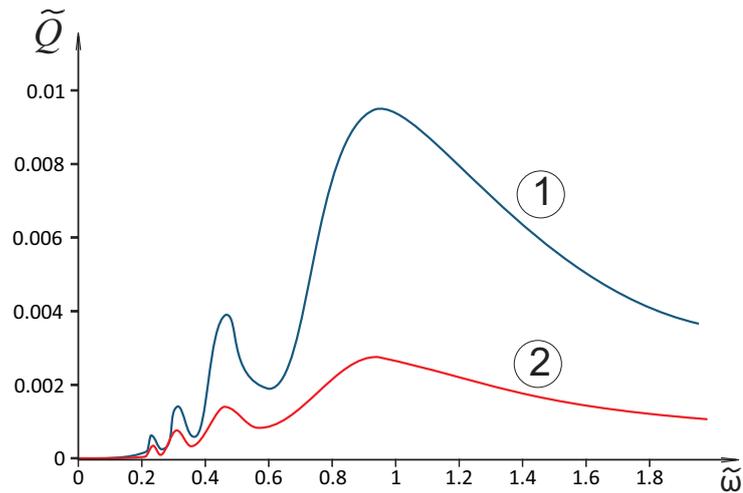


Рисунок 3.8 — Зависимость безразмерной удельной мощности диссипации \tilde{Q} от безразмерной частоты $\tilde{\omega}$ для системы диэлектрических (1) и металлических (2) наночастиц при $\tilde{h} = 0.3$ (численные результаты).

уравнения влияние вихревых токов на динамическое поведение намагниченности учитывается двумя дополнительными параметрами, первый из которых можно интерпретировать как дополнительное внешнее магнитное поле, а второй — как дополнительный параметр затухания Гильберта электродинамического происхождения. Для этих параметров найдены явные аналитические выражения и было показано, что в большинстве случаев дополнительным магнитным полем можно пренебречь.

Необходимость учета проводимости наночастиц и действенность эффективного уравнения ЛЛГ продемонстрированы на двух примерах. В первом рассматривается важный с прикладной точки зрения эффект прецессионного переключения намагниченности наночастицы под действием импульса внешнего магнитного поля. Путем численного решения этого уравнения построены диаграммы переключения для диэлектрических и металлических наночастиц и показано, что проводимость может существенно влиять на их вид. Во втором примере аналитически и численно рассматривается проблема диссипации энергии в системах диэлектрических и металлических наночастиц с равномерным распределением направлений их осей легкого намагничивания. Показано, в частности, что удельная мощность диссипации как функция частоты внешнего циркулярно-поляризованного магнитного поля сильно зависит от проводимости наночастиц.

4 СТАТИСТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА УРАВНЕНИЯ ЛАНДАУ-ЛИФШИЦА С БЕЛЫМ ШУМОМ ПУАССОНА

В последние годы особый интерес у специалистов, занимающихся исследованием наноматериалов и их физических свойств, вызывают магнитные наночастицы. Такой интерес обусловлен как широким их использованием во многих областях науки и техники, так и перспективами их потенциальных применений [80, 85, 98]. Например, магнитные наночастицы оксидов железа используют в технологиях разделения отходов, целенаправленной доставке лекарств, гипотермической обработке раковых клеток и т.д. С другой стороны, изучение магнитных свойств наноматериалов позволяет значительно расширить область их применения и эффективно использовать в средствах магнитной записи информации, сенсорах на эффекте гигантского магнетосопротивления, магнитных затворах, феррожидкостях и др.

Вследствие внешних и внутренних флуктуаций, которые являются неотъемлемой частью реальных систем, динамика магнитного момента наночастицы является случайной. Во многих случаях для описания поведения магнитного момента может быть использовано стохастическое уравнение Ландау-Лифшица, в котором влияние флуктуаций учитывается посредством включения в эффективное магнитное поле дополнительного слагаемого с заданными статистическими свойствами. Обычно при изучении роли тепловых флуктуаций это слагаемое аппроксимируется зависящим от времени случайным вектором, компонентами которого являются независимые гауссовские белые шумы. В этом приближении динамика магнитного момента является марковской, а плотность вероятности какого-либо направления магнитного момента удовлетворяет дифференциальному уравнению Фоккера-Планка [61, 99, 100]. В частности, в рамках данного подхода изучены особенности магнитной релаксации в двухмерных ансамблях ферромагнитных наночастиц с магнитодипольным взаимодействием [63, 64], свойства индуцированной намагниченности систем невзаимодействующих и взаимодействующих наночастиц в циркулярно-поляризованном магнитном поле [66, 67, 101], и зависимость среднего времени между последовательными переориентациями магнитного момента от характеристик этого поля [102].

Благодаря центральной предельной теореме [34] приближение гаус-

совского белого шума является вполне обоснованным, если соответствующий случайный процесс, порождающий этот шум, можно интерпретировать как результат большого числа случайных факторов, ни один из которых не является доминирующим. В противном случае при моделировании случайной динамики магнитного момента может быть использован подходящий для описания конкретной ситуации негауссовский белый шум. Из всего многообразия таких шумов особый интерес представляют белые шумы Леви и Пуассона. Поскольку первый порождается устойчивым процессом Леви, его важность проистекает из обобщенной центральной предельной теоремы, согласно которой только устойчивые распределения имеют область притяжения [103]. С другой стороны, белый шум Пуассона, представляющий собой случайную последовательность дельта-импульсов, распределенных по закону Пуассона, является удобной моделью для описания динамики систем, включая динамику магнитных моментов наночастиц, подверженных сильным, но кратковременным воздействиям.

В данном разделе будет получено уравнение для плотности вероятности магнитного момента однодоменной наночастицы, находящейся в случайном магнитном поле, компоненты которого имеют характеристики белого шума Пуассона. Поскольку динамика магнитного момента оказывается довольно сложной, для решения этой проблемы будет использовано модифицированное уравнение Ландау-Лифшица.

4.1 Модифицированное уравнение Ландау-Лифшица

Мы рассматриваем простейшую модель однодоменной ферромагнитной наночастицы, которая характеризуется магнитным моментом $\mathbf{m} = \mathbf{m}(t)$ с $|\mathbf{m}| = m = \text{const}$. В этом случае случайная динамика вектора \mathbf{m} может быть описана стохастическим уравнением Ландау-Лифшица

$$\frac{d\mathbf{m}}{dt} = -\gamma \mathbf{m} \times (\mathbf{H}_{\text{eff}} + \mathbf{h}) - \frac{\alpha\gamma}{m} \mathbf{m} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{H}_{\text{eff}}), \quad (4.1)$$

где $\gamma (>0)$ — гиромагнитное отношение, $\alpha (>0)$ — параметр затухания, знак \times обозначает векторное произведение, $\mathbf{H}_{\text{eff}} = -\partial W / \partial \mathbf{m}$ — эффективное магнитное поле, которое действует на магнитный момент, W — магнитная

энергия наночастицы, и $\mathbf{h} = \mathbf{h}(t)$ – случайное магнитное поле. Вводя безразмерные время $\tau = \gamma H_0 t$ и энергию $E = W/(mH_0)$ (H_0 – характерное магнитное поле, в качестве которого можно выбрать поле анизотропии), уравнение (4.1) в сферических координатах сводится к системе двух уравнений

$$\dot{\theta} = f_1 + \psi_1, \quad \dot{\varphi} = f_2 + \frac{1}{\sin \theta} \psi_2 \quad (4.2)$$

для полярного $\theta = \theta(t)$ и азимутального $\varphi = \varphi(t)$ углов вектора \mathbf{m} . Здесь точка над θ и φ обозначает дифференцирование по безразмерному времени,

$$\begin{aligned} f_1 = f_1(\theta, \varphi, t) &= - \left(\alpha \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) E, \\ f_2 = f_2(\theta, \varphi, t) &= \frac{1}{\sin \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\alpha}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) E, \end{aligned} \quad (4.3)$$

а величины $\psi_{1,2} = \psi_{1,2}(\theta, \varphi, \tau)$ выражаются через безразмерные компоненты $g_\kappa = h_\kappa(\tau)/H_0$ ($\kappa = x, y, z$) случайного магнитного поля \mathbf{h} следующим образом:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= -\sin \varphi g_x + \cos \varphi g_y, \\ \psi_2 &= \sin \theta g_z - \cos \theta (\cos \varphi g_x + \sin \varphi g_y). \end{aligned} \quad (4.4)$$

В дальнейшем мы будем аппроксимировать компоненты g_κ белыми шумами с заданными статистическими характеристиками. Поскольку, согласно (4.4), эти шумы являются мультипликативными, система стохастических уравнений (4.2) должна быть тщательно определена. Для этой цели мы перепишем (4.2) в дифференциальной форме и воспользуемся интерпретацией Ито [104] (см. также [61, 100]) этой системы. В результате получаем

$$d\theta = f_1 d\tau + d\eta_1, \quad d\varphi = f_2 d\tau + \frac{1}{\sin \theta} \eta_2, \quad (4.5)$$

где

$$\begin{aligned} d\eta_1 &= -\sin \varphi d\zeta_x + \cos \varphi d\zeta_y, \\ d\eta_2 &= \sin \theta d\zeta_z - \cos \theta (\cos \varphi d\zeta_x + \sin \varphi d\zeta_y) \end{aligned} \quad (4.6)$$

и $d\zeta_\kappa = d\zeta_\kappa(\tau) = \int_\tau^{\tau+d\tau} d\tau' g_\kappa(\tau')$ с $\tau = kd\tau$ ($k = 1, 2, \dots$). Относительно случайных функций $d\zeta_\kappa(\tau)$ предполагается, что при разных κ и/или k они независимы, одинаково распределены и имеют нулевые средние значения. Это означает, что должны выполняться условия $\langle d\zeta_\kappa(\tau) \rangle = 0$, $\langle d\zeta_\kappa(\tau) d\zeta_{\kappa'}(\tau') \rangle = 0$ ($\kappa \neq \kappa'$ и/или $\tau \neq \tau'$) и $\langle [d\zeta_x(\tau)]^2 \rangle = \langle [d\zeta_y(\tau)]^2 \rangle = \langle [d\zeta_z(\tau)]^2 \rangle$, где угловые скобки обозначают усреднение по реализациям случайных функций $d\zeta_\kappa(\tau)$.

Используя эти средние и формулы (4.6), можно показать, что $\langle d\eta_p(\tau) \rangle = 0$ ($p = 1, 2$), $\langle d\eta_p(\tau) d\eta_{p'}(\tau') \rangle = 0$ ($p \neq p'$ и/или $\tau \neq \tau'$) и $\langle [d\eta_p(\tau)]^2 \rangle = \langle [d\zeta_x(\tau)]^2 \rangle$. Таким образом, случайные функции $d\zeta_\kappa(\tau)$ и $d\eta_p(\tau)$ имеют нулевые средние значения и одинаковые корреляционные функции. В связи с этим представляется целесообразным рассмотреть модифицированную систему уравнений (4.5), в которой приращения $d\eta_p$ порождаются белыми шумами $\zeta_\kappa(\tau)$, имеющими те же статистические характеристики, что и $g_\kappa(\tau)$. Другими словами, мы представляем $d\eta_p$ в виде

$$d\eta_p = \int_\tau^{\tau+d\tau} d\tau' \xi_p(\tau') \quad (4.7)$$

и полагаем, что независимые шумы $\xi_1(\tau)$ и $\xi_2(\tau)$ имеют те же статистические свойства, что $g_x(\tau)$. Во избежание недоразумений сразу отметим, что в статистическом смысле система уравнений (4.5) с $d\eta_p$ из (4.6) не эквивалентна этой же системе с $d\eta_p$ из (4.7). Причина очевидна — в первом случае приращения $d\eta_p$ зависят от углов θ и φ , тогда как во втором случае такой зависимости нет. Тем не менее, изучение статистических свойств магнитного момента в рамках модифицированного уравнения Ландау-Лифшица вполне оправданно, поскольку, с одной стороны, влияние негауссовских белых шумов на динамику \mathbf{m} ранее не рассматривалось, а с другой — модифицированное уравнение проще исходного.

Рассмотрим важный с точки зрения приложений случай, когда белый шум $\xi(\tau)$ (для упрощения обозначений мы опускаем индекс p) является пуассоновским, т.е.,

$$\xi(\tau) = \sum_{i=1}^{n(\tau)} z_i \delta(\tau - \tau_i). \quad (4.8)$$

Здесь z_i — независимые случайные величины, распределенные на интервале $(-\infty, +\infty)$ с некоторой плотностью вероятности $q(z)$ и имеющие нулевые средние значения, $\delta(\tau)$ — дельта-функция Дирака, τ_i — моменты появления дельта-импульсов, и $n(\tau)$ — пуассоновский процесс, характеризующийся вероятностью $P(n(\tau) = n) = (\nu\tau)^n e^{-\nu\tau} / n!$ (параметр ν обозначает интенсивность процесса) того, что произошло $n(\tau) \geq 0$ дельта-импульсов на временном интервале $(0, \tau]$. Используя (4.7) и (4.8), можно показать [105], что плотность вероятности $p(\mu; d\tau) = \langle \delta(\mu - d\eta) \rangle$ того, что за время $d\tau$ произойдет скачок, величина которого $d\eta = \int_{\tau}^{\tau+d\tau} d\tau' \xi(\tau')$ равна μ , дается выражением

$$p(\mu; d\tau) = (1 - \nu d\tau) \delta(\mu) + \nu d\tau q(\mu). \quad (4.9)$$

Поскольку вероятность $1 - \int_{-z_0}^{z_0} dz q(z)$ значений z с $|z| > z_0$ (z_0 — произвольный положительный параметр) в общем случае отлична от нуля, направление вектора \mathbf{m} в моменты появления дельта-импульсов изменяется скачкообразно. Важно подчеркнуть, что это изменение может происходить путем многократного вращения магнитного момента. Действительно, так как $d\eta_p \in (-\infty, \infty)$ и, следовательно, $d\theta, d\varphi \in (-\infty, \infty)$, а $\theta(\tau) \in [0, \pi]$ и $\varphi(\tau) \in [0, 2\pi)$, из условия $\mathbf{m}(\theta(\tau + d\tau), \varphi(\tau + d\tau)) = \mathbf{m}(\theta(\tau) + d\theta, \varphi(\tau) + d\varphi)$ можно получить следующие соотношения:

$$\begin{aligned} \theta(\tau + d\tau) &= \theta(\tau) + d\theta - 2\pi n, \\ \varphi(\tau + d\tau) &= \varphi(\tau) + d\varphi - 2\pi m \end{aligned} \quad (4.10)$$

и

$$\begin{aligned}\theta(\tau + d\tau) &= -\theta(\tau) - d\theta - 2\pi n, \\ \varphi(\tau + d\tau) &= \varphi(\tau) + d\varphi - 2\pi m - \pi.\end{aligned}\tag{4.11}$$

Здесь, n и m — целые числа, которые при заданных $d\theta$ и $d\varphi$ определяют число и направление оборотов вектора \mathbf{m} в соответствующих плоскостях.

Таким образом, система уравнений (4.5) с белым шумом Пуассона теперь полностью определена, и мы в состоянии найти отвечающее ей обобщенное уравнение Фоккера-Планка

4.2 Обобщенное уравнение Фоккера-Планка

Определяем плотность вероятности $P = P(\theta, \varphi, \tau)$ того, что $\theta(\tau) = \theta$ и $\varphi(\tau) = \varphi$, стандартным образом

$$P = \langle \delta(\theta - \theta(\tau)) \delta(\varphi - \varphi(\tau)) \rangle,\tag{4.12}$$

где угловые скобки можно интерпретировать как усреднение по реализациям случайных функций $\theta(\tau)$ и $\varphi(\tau)$. Используя соотношения (4.10) и (4.11), плотность вероятности в момент времени $\tau + d\tau$, $\tilde{P} = P(\theta, \varphi, \tau + d\tau)$, может быть представлена в виде

$$\begin{aligned}\tilde{P} &= \sum_{n,m} \langle \delta(\theta - \theta(\tau) - d\theta + 2\pi n) \delta(\varphi - \varphi(\tau) - d\varphi + 2\pi m) \\ &\quad + \delta(\theta + \theta(\tau) + d\theta + 2\pi n) \delta(\varphi - \varphi(\tau) - d\varphi + 2\pi m + \pi) \rangle.\end{aligned}\tag{4.13}$$

Важно отметить, что усреднение в (4.13) производится по реализациям случайных функций $\theta(\tau + d\tau)$ и $\varphi(\tau + d\tau)$. Принимая во внимание независимость случайных величин $d\eta_p$ от $\theta(\tau)$ и $\varphi(\tau)$, это усреднение удобно осуществить в два этапа. На первом следует провести усреднение по значениям случайных величин $d\eta_p$, а затем результат усреднить по реализациям $\theta(\tau)$

и $\varphi(\tau)$. С учетом уравнений (4.5) это дает

$$\begin{aligned} \tilde{P} = & \sum_{n,m} \int_0^\pi d\theta' \int_0^{2\pi} d\varphi' P(\theta', \varphi', \tau) \int \int_{-\infty}^{\infty} d\mu_1 d\mu_2 p(\mu_1; d\tau) p(\mu_2; d\tau) \\ & \times [\delta(\theta - \theta' - f'_1 d\tau - \mu_1 + 2\pi n) \delta(\varphi - \varphi' - f'_2 d\tau - \mu_2 / \sin \theta' + 2\pi m) \\ & + \delta(\theta + \theta' + f'_1 d\tau + \mu_1 + 2\pi n) \delta(\varphi - \varphi' - f'_2 d\tau - \mu_2 / \sin \theta' + 2\pi m + \pi)], \end{aligned} \quad (4.14)$$

где $f'_{1,2} = f_{1,2}(\theta', \varphi', \tau)$.

Теперь, используя (4.13) и (4.14), найдем производную $\partial P / \partial \tau = \lim_{d\tau \rightarrow 0} (\tilde{P} - P) / d\tau$. Для этого в формуле (4.14) достаточно учесть лишь линейные по $d\tau$ слагаемые. Записав в этом приближении

$$\begin{aligned} p(\mu_1; d\tau) p(\mu_2; d\tau) = & (1 - 2\nu d\tau) \delta(\mu_1) \delta(\mu_2) \\ & + \nu d\tau \delta(\mu_1) q(\mu_2) + \nu d\tau \delta(\mu_2) q(\mu_1), \end{aligned} \quad (4.15)$$

и воспользовавшись свойствами дельта-функции, после ряда преобразований получаем искомое обобщенное уравнение Фоккера-Планка

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} P = & -\frac{\partial}{\partial \theta} (f_1 P) - \frac{\partial}{\partial \varphi} (f_2 P) - 2\nu P + \nu \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi' P(\theta, \varphi', \tau) \\ & \times \sum_m q([\varphi - \varphi' + 2\pi m] \sin \theta) + \nu \int_0^\pi d\theta' P(\theta', \varphi, \tau) \sum_n q(\theta - \theta' + 2\pi n) \\ & + \nu \int_0^\pi d\theta' [P(\theta', \varphi + \pi, \tau)|_{\varphi < \pi} + P(\theta', \varphi - \pi, \tau)|_{\varphi > \pi}] \sum_n q(-\theta - \theta' + 2\pi n). \end{aligned} \quad (4.16)$$

Это уравнение, в отличие от обыкновенного уравнения Фоккера-Планка, является интегро-дифференциальным, что обусловлено скачкообразным характером изменения направления вектора магнитного момента под действием шума Пуассона. Как обычно, решение уравнения (4.16) должно быть нормировано, $\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi P(\theta, \varphi, \tau) = 1$, и удовлетворять некоторому начальному условию $P(\theta, \varphi, 0) = P_0(\theta, \varphi)$.

4.3 Анализ обобщенного уравнения Фоккера-Планка

Рассмотрим некоторые свойства решений обобщенного уравнения Фоккера-Планка (4.16). Прежде всего отметим, что плотность вероятности $P(\theta, \varphi, \tau)$ является неотрицательной функцией. Это следует непосредственно из определения (4.12) и свойств дельта-функции. Из этого же определения следует и условие нормировки $\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi P(\theta, \varphi, \tau) = 1$. Однако, чтобы дополнительно проверить корректность уравнения (4.16), целесообразно также показать, что это уравнение сохраняет нормировку. С этой целью проинтегрируем обе его части по всем допустимым значениям углов θ и φ . Тогда, меняя порядок следования операций дифференцирования и интегрирования и учитывая условие нормировки, легко видеть, что левая часть равна нулю. Аналогично, преобразуя правую часть с учетом того факта, что функции P и $f_{1,2}$ периодичны по переменной φ с периодом 2π , нетрудно убедиться, что если

$$\int_0^{2\pi} d\varphi [(f_1 P)|_{\theta=\pi} - (f_1 P)|_{\theta=0}] = 0, \quad (4.17)$$

тогда проинтегрированное уравнение (4.16) принимает вид $0 = 0$. Таким образом, уравнение (4.16) при выполнении условия (4.17) сохраняет нормировку P .

Рассмотрим теперь простейший случай свободного магнитного момента, взаимодействующего лишь с пуассоновским шумом. В этом случае $f_1 = f_2 = 0$, и стационарное решение уравнения (4.16), $P_{\text{st}} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} P(\theta, \varphi, \tau)$, можно искать в виде $P_{\text{st}} = F(\theta)$. Согласно (4.16), функция $F(\theta)$ удовлетворяет уравнению

$$\begin{aligned} 2F(\theta) = & F(\theta) \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi' \sum_m q([\varphi - \varphi' + 2\pi m] \sin \theta) \\ & + \int_0^\pi d\theta' F(\theta') \sum_n [q(\theta - \theta' + 2\pi n) + q(-\theta - \theta' + 2\pi n)], \end{aligned} \quad (4.18)$$

которое с учетом соотношения

$$\int_0^{2\pi} d\varphi' \sum_m q([\varphi - \varphi' + 2\pi m] \sin \theta) = \frac{1}{\sin \theta} \quad (4.19)$$

сводится к виду

$$F(\theta) = \int_0^\pi d\theta' F(\theta') \sum_n [q(\theta - \theta' + 2\pi n) + q(-\theta - \theta' + 2\pi n)]. \quad (4.20)$$

Используя соотношение

$$\sum_n \int_0^\pi d\theta [q(\theta - \theta' + 2\pi n) + q(-\theta - \theta' + 2\pi n)] = \int_{-\infty}^\infty dz q(z) = 1, \quad (4.21)$$

можно легко проверить, что интегральное уравнение (4.20) совместимо с условием нормировки $2\pi \int_0^\pi d\theta F(\theta) = 1$ стационарной плотности вероятности $F(\theta)$. Интересно также отметить, что решение уравнения (4.20) не описывает равномерное распределение магнитного момента, как можно было бы ожидать из физических соображений. Действительно, в случае равномерного распределения имело бы место представление $F(\theta) = \sin \theta / 4\pi$. Однако эта функция не является решением уравнения (4.20), поскольку при $\theta = 0$ его левая часть равна нулю, а правая — нет. Тот факт, что плотность вероятности $F(\theta) = \sin \theta / 4\pi$, отвечающая равномерному распределению магнитного момента, не является решением стационарного уравнения (4.20), проистекает от использования интерпретации Ито исходной системы стохастических уравнений (4.2). Отметим в этой связи, что аналогичная ситуация — несовпадение стационарных решений уравнения Фоккера-Планка при различных интерпретациях уравнения Ланжевена с мультипликативным шумом — имеет место и в простейшем случае гауссовского белого шума [100].

4.4 Выводы к разделу 4

В рамках модифицированного уравнения Ландау-Лифшица впервые рассмотрена стохастическая динамика магнитного момента наночастицы,

индуцированная белым шумом Пуассона. Используя интерпретацию Ито стохастических уравнений и скачкообразное изменение направления магнитного момента, выведено обобщенное уравнение Фоккера-Планка для плотности вероятности его ориентации. Анализ этого уравнения, основной особенностью которого является его интегральный характер, показал, что изменение плотности вероятности происходит с сохранением ее нормировки. Установлено также, что вследствие использования интерпретации Ито уравнения Ландау-Лифшица, стационарное распределение свободного магнитного момента не является равномерным.

5 МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ФЕРРОРИЖИДКОСТЕЙ С ПОМОЩЬЮ УСОВЕРШЕНСТВОВАННОГО МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Дисперсные структуры, представляющие собой ансамбль ферромагнитных наночастиц, взвешенных в жидкости, называются ферромагнитными жидкостями или феррожидкостями [106]. Такие системы сочетают в себе одновременно свойства жидкости (вязкость, текучесть, поверхностное натяжение) и свойства ферромагнетика (внутреннее магнитное поле, большая магнитная проницаемость, управляемость внешними магнитными полями). Поэтому ферромагнитные жидкости являются достаточно притягательными средами с точки зрения самых разнообразных практических применений, спектр которых простирается от подачи ракетного топлива в условиях невесомости до методов сепарации макромолекул [107], новых методов терапии, таких как адресная доставка лекарственных препаратов [85], магнитная гипертермия [108].

Описание свойств феррожидкостей как однородных сплошных сред хорошо развито в рамках предложенной Розензвейгом [106] теории феррогидродинамики. Однако, данное приближение игнорирует возможные коллективные эффекты, обусловленные взаимодействием частиц в жидкости, не дает возможность исследовать структурные свойства феррожидкости и характер возможной кластеризации частиц. Данные эффекты особенно важны для ограниченных объемов феррожидкости. В литературе известен целый ряд моделей, учитывающих взаимодействие. Общей их особенностью является использование известной теории парамагнитного газа Вейеса [109]. В дальнейшем либо проводилось умножение аргумента функции Ланжевена на феноменологический, отвечающий за взаимодействие множитель [110], либо применялись модификации метода среднего дипольного поля [111, 112]. Результаты, полученные с помощью указанных приближений, качественно совпадают с экспериментальными для достаточно разбавленных феррожидкостей. Однако, при больших концентрациях на ее свойства значительно влияет характер упорядочения наночастиц, или так называемая структура феррожидкости.

Сложности аналитического описания стимулируют развитие числен-

ных методов. Наиболее широко для описания равновесных свойств ферромагнитных жидкостей применяется известный метод Монте-Карло [113]. Исходя из простоты его программной реализации, а также сравнительно невысоких требований к вычислительной мощности, с его помощью проводилось подавляющее большинство численных экспериментов начиная с 80-х годов [114, 115], до наших дней [116]. В то же время, метод Монте-Карло, строго говоря, не позволяет рассматривать неравновесные процессы и, кроме того, возникают технические проблемы описания поведения кластеров в ферромагнитных жидкостях [117], связанные численным описанием возбуждения, передающемуся всему кластеру одновременно.

Другой хорошо известный метод численного моделирования - метод молекулярной динамики [113] - лишен указанных недостатков, однако является более ресурсо-емким. Поэтому, его широкое применение для изучения свойств ферромагнитных жидкостей началось относительно недавно: порядка 10 лет назад. Как правило, используют две его разновидности: метод Броуновской динамики (Brownian Dynamics) [118] и моделирование уравнения Ланжевена (Langevin Simulation) [119]. В настоящем исследовании используется именно последняя методика, поскольку она имеет более простую физическую интерпретацию.

Целью данной работы является используя метод молекулярной динамики, решая уравнения Ланжевена для каждой частицы ансамбля, описать равновесные и структурные свойства ферромагнитных жидкостей, заключенных в сосуд вытянутой формы.

5.1 Описание модели

В предположении, что жидкий носитель является неподвижным, или же для описания равновесных свойств феррожидкостей, достаточно задать уравнения движения, а также уравнения динамики магнитного момента для каждой ферромагнитной частицы из N частиц, образующих ансамбль, взвешенных в жидкости вязкостью η . Как правило, в реальной ситуации все частицы изготовлены из одинакового материала и, в первом приближении, их можно считать однородными с плотностью D и намагниченностью μ .

Рассмотрим некоторую (i -ую) частицу объемом V_i , массой $M_i = V_i D$, моментом инерции $I_i = \oint_{V_i} dV D r_1^2$ (r_1 - расстояние элемента частицы dV до оси вращения), и магнитным моментом $m_i = V_i \mu$. Пусть в выбранной декартовой системе координат положение центра частицы задается радиус-вектором r_i . Частица будет находится в суммарном дипольном поле, создаваемом магнитными моментами других частиц. С учетом внешнего поля \vec{H}^{ext} , результирующее поле, действующее на магнитный момент выбранной частицы, приобретает вид

$$\vec{H}_i = \sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{3\vec{r}_{ij}(\vec{m}_j \vec{r}_{ij}) - \vec{m}_j r_{ij}^2}{|\vec{r}_{ij}|^5} + \vec{H}^{ext}, \quad (5.1)$$

где $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$ - радиус-вектор, соединяющий центры i -ой и j -ой частиц. Сила, которую обуславливает поле вида (5.1), будет определяться как [106]

$$\vec{F}_i^{dip} = -\mu_0(\vec{m}_i \nabla) \vec{H}_i, \quad (5.2)$$

где $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ Гн/м, $\nabla = \vec{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \vec{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z}$.

После выполнения соответствующих процедур дифференцирования, выражение (5.2) можно переписать в виде

$$\vec{F}_i^{dip} = \sum_{j=1, j \neq i}^N \left[\frac{3\vec{r}_{ij}(\vec{m}_j \vec{m}_i) + \vec{m}_i(\vec{m}_j \vec{r}_{ij}) + \vec{m}_j(\vec{m}_i \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} - 15 \frac{\vec{r}_{ij}(\vec{m}_j \vec{r}_{ij})(\vec{m}_i \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^7} \right], \quad (5.3)$$

Именно дальнедействующая дипольная сила (5.3) задает характер поведения феррожидкостей с достаточно большой объемной долей частиц.

Для предотвращения нежелательной агломерации частиц ансамбля под действием дипольной силы (5.3), частицы, покрывают специальным немагнитным слоем, обеспечивающим отталкивание. Как правило, такое отталкивание носит быстро убывающий характер и моделируется с исполь-

зование потенциала Леннарда-Джонса [109]. Явный вид результирующей силы отталкивания имеет вид [119]

$$\vec{F}_i^{sr} = 24e \sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}^2} \left[\left(\frac{s}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{s}{r_{ij}} \right)^6 \right]. \quad (5.4)$$

где e – глубина потенциальной ямы, s – расстояние между центрами частиц, при котором $\vec{F}_i^{sr} = 0$.

На частицу в вертикальном направлении также будут действовать сила тяжести и сила Архимеда с преобладанием первой. Однако, поскольку в реальных феррожидкостях за счет Броуновского движения не наблюдается осадка ферромагнитных частиц [120], результирующим действием двух указанных сил можно пренебречь.

Сила сопротивления жидкости поступательному движению для не слишком больших скоростей частиц принимается пропорциональной первой производной по времени от радиус-вектора с коэффициентом пропорциональности G_i^t , который зависит от свойств жидкости и формы частицы.

Наконец, взаимодействие с термостатом удобно представить действием случайной силы X_i^t со статистическими характеристиками [121]

$$\langle X_{i\alpha}^t \rangle = 0, \quad \langle X_{i\alpha}^t(t) X_{i\beta}^t(t') \rangle = 2k_B T G_i^t \delta_{\alpha\beta} \delta(t - t'), \quad (\alpha, \beta = x, y, z). \quad (5.5)$$

где $\delta(\cdot)$ – дельта-функция Дирака; $\delta_{\alpha\beta}$ – дельта-символ Кронекера; $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К – постоянная Больцмана; T – термодинамическая температура. С учетом вышесказанного, уравнение, описывающее поступательное движение выбранной частицы, будет иметь вид

$$M_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = \vec{F}_i^{dip} + \vec{F}_i^{sr} - G_i^t \frac{d\vec{r}_i}{dt} + \vec{X}_i^t \quad (5.6)$$

Вращательное движение каждой частицы при этом подчиняется уравнению [119]

$$I_i \frac{d\vec{\omega}_i}{dt} = \vec{N}_i - G_i^r \vec{\omega}_i + \vec{X}_i^{r'} \quad (5.7)$$

где ω_i — угловая скорость i -ой частицы; N_i — механический момент, действующий на частицу, компоненты которого, соответственно, равны $N_{ix} = m_{iy}H_{iz} - m_{iz}H_{iy}$; $N_{iy} = m_{iz}H_{ix} - m_{ix}H_{iz}$; $N_{iz} = m_{ix}H_{iy} - m_{iy}H_{ix}$ ($m_{x,y,z}$ — проекции вектора магнитного момента на оси декартовой системы координат); G_i^r — коэффициент сопротивления жидкости вращательному движению; $X_i^{r'}$ — случайный момент сил, моделирующий взаимодействие i -ой частицы с термостатом;

В общем случае векторное уравнение второго порядка (5.7) распадается на шесть уравнение первого порядка относительно угловых координат и угловых скоростей. В случае, когда магнитный момент равен константе, а вращение вокруг магнитного момента частицы не влияет на ее магнитные свойства, уравнение (5.7) можно записать в виде пяти скалярных уравнений первого порядка. С учетом того, что нас в дальнейшем будут интересовать лишь равновесные свойства, а результирующее поле, действующее на каждую частицу будет постоянно флуктуировать за счет постоянного изменения локальных дипольных полей, точную систему (5.7) можно приближенно заменить двумя уравнениями второго порядка для вращения частицы относительно двух неподвижных осей. Данная операция позволяет описать вращательное движение каждой частицы четырьмя уравнениями первого порядка относительно азимутального (θ_i) и полярного (φ_i) углов, которая подходит для последующего численного решения таких систем для каждой частицы ансамбля. Таким образом достигается оптимизация вычислительных ресурсов. Итак, в дальнейшем полагаем, что вращательная динамика описывается уравнениям

$$I_i \frac{d^2\varphi_i}{dt^2} = N_{iz} - G_i^r \frac{d\varphi_i}{dt} + X_i^r, \quad (5.8)$$

$$I_i \frac{d^2\theta_i}{dt^2} = -N_{ix} \sin \varphi_i + N_{iy} \cos \varphi_i - G_i^r \frac{d\theta_i}{dt} + X_i^r, \quad (5.9)$$

где X_i^r - проекции случайного момента сил, на мгновенные оси вращения со статистическими характеристиками [119]

$$\langle X_{i\alpha}^r \rangle = 0, \langle X_{i\alpha}^r(t) X_{i\beta}^r(t') \rangle = 3k_B T G_i^r \delta_{\alpha\beta} \delta(t - t'), (\alpha, \beta = \theta, \varphi). \quad (5.10)$$

Здесь разница в численном коэффициенте интенсивности шума по сравнению с выражением (5.5) связана с наличием только двух угловых координат вместо трех поступательных, тогда как тепловая энергия должна распределяться в одинаковом соотношении между вращательным и поступательным движениями.

Кроме того, внутренняя динамика намагниченности каждой частицы подчиняется уравнению Ландау-Лифшица [89]

$$\frac{d\vec{m}_i}{dt} = -\gamma \vec{m}_i \times (\vec{H}_i^{eff} + \vec{X}_i^m) - \frac{\lambda\gamma}{m_i} \vec{m}_i \times (\vec{m}_i \times \vec{H}_i^{eff}), \quad (5.11)$$

где $\gamma = 1.76 \cdot 10^{11}$ рад·с⁻¹·Тл⁻¹ – гиромагнитное отношение; λ – безразмерный параметр затухания; $\vec{H}_i^{eff} = \partial W_i / \partial \vec{m}_i$ – эффективное магнитное поле, действующее на магнитный момент; W_i – магнитная энергия частицы; \vec{X}_i^m – случайное магнитное поле, которое моделирует действие термостата.

Для упрощения последующих вычислений и моделирования будем предполагать, что все частицы имеют форму шара одинакового радиуса R , и, как следствие, одинаковый модуль магнитного момента $m_i = m = 4\pi R^3 \mu / 3$, одинаковую массу $M_i = M = \frac{4}{3} \pi R^3 D$, момент инерции $I_i = I = \frac{2}{5} m R^2 = \frac{2}{2} \cdot \frac{4}{3} \pi R^3 D R^2 = \frac{8}{15} \pi R^5 D$, коэффициент сопротивления жидкости поступательному движению, согласно закону Стокса, $G_i^t = G^t = 6\pi\eta R$ и наконец, одинаковый коэффициент сопротивления жидкости вращательному движению $G_i^r = G^r = 8\pi\eta R^3$.

Для удобства последующего анализа уравнения (5.6)-(5.11) целесообразно записать в обезразмеренном виде с учетом следующих замен: $\vec{\rho}_i = \vec{r}_i / R$, $\vec{u}_i = \vec{m}_i / m$, $\tau = t / T_{ch}$

$$T_{ch} = R/\mu\sqrt{3D/4\mu_0} \quad (5.12)$$

– характерный период механического движения; $\Gamma = 2\pi\eta RT_{ch}/DV$ – приведенный коэффициент сопротивления (здесь $V = 4\pi R^3/3$ – объем частицы); $\vec{h}_i = 3\vec{H}_i/4\pi\mu$; $\vec{h}^{ext} = 3\vec{H}^{ext}/4\pi\mu$; $\sigma = s/R$; $\varepsilon = eT_{ch}^2/VDR$; $\vec{h}_i^{eff} = 3\vec{H}_i^{eff}/4\pi\mu$; $\vec{\Xi}_i^m = 3\vec{X}_i^m/4\pi\mu$; $\tau_1 = t/T_{ch1}$

$$T_{ch1} = 3/(4\pi\mu\gamma) \quad (5.13)$$

– характерный период прецессии магнитного момента. В результате, уравнения, описывающие динамику выбранной частицы, приобретают вид

$$\frac{d^2\vec{\rho}_i}{d\tau^2} = \vec{f}_i^{dip} + \vec{f}_i^{sr} - 3\Gamma\frac{d\vec{\rho}_i}{d\tau} + \frac{T_{ch}^2}{VRD}\vec{\Xi}^t, \quad (5.14)$$

где

$$\vec{f}_i^{dip} = \sum_{j=1, j \neq i}^N \left[3 \frac{\vec{\rho}_{ij}(\vec{u}_j\vec{u}_i) + \vec{u}_i(\vec{u}_j\vec{\rho}_{ij}) + \vec{u}_j(\vec{u}_i\vec{\rho}_{ij})}{\rho_{ij}^5} - 15 \frac{\vec{\rho}_{ij}(\vec{u}_i\vec{\rho}_{ij})(\vec{u}_j\vec{\rho}_{ij})}{\rho_{ij}^7} \right], \quad (5.15)$$

$$\vec{f}_i^{sr} = 24\varepsilon \sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{\vec{\rho}_{ij}}{\rho_{ij}^2} \left[\left(\frac{\sigma}{\rho_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{\rho_{ij}} \right)^6 \right], \quad (5.16)$$

$$\frac{2}{5} \cdot \frac{d^2\varphi_i}{d\tau^2} = (u_{ix}h_{iy} - u_{iy}h_{ix}) - 4\Gamma\frac{d\varphi_i}{d\tau} + \frac{T_{ch}^2}{VR^2D}\vec{\Xi}_\varphi^r \quad (5.17)$$

$$\frac{2}{5} \cdot \frac{d^2\theta_i}{d\tau^2} = -(u_{iy}h_{iz} - u_{iz}h_{iy}) \sin \varphi_i + (u_{iz}h_{ix} - u_{ix}h_{iz}) \cos \varphi_i - 4\Gamma \frac{d\theta_i}{d\tau} + \frac{T_{ch}^2}{VR^2D} \Xi_{\theta}^r, \quad (5.18)$$

где

$$\vec{h}_i = \sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{3\vec{\rho}_{ij}(\vec{u}_j \vec{\rho}_{ij}) - \vec{u}_j \rho_{ij}^2}{\rho_{ij}^5} + \vec{h}^{ext}, \quad (5.19)$$

$$\frac{d\vec{u}_i}{dt} = -\gamma \vec{u}_i \times (\vec{h}_i^{eff} + \vec{\Xi}_i^m) - \lambda \gamma \vec{u}_i \times (\vec{u}_i \times \vec{h}_i^{eff}). \quad (5.20)$$

Принимая во внимание свойство дельта-функции Дирака $\delta(t) = \delta(\tau \cdot T_{ch}) = \delta(\tau)/T_{ch}$, корреляционные функции случайных сил и моментов сил в уравнениях (5.14), (5.17), (5.18) равны, соответственно

$$\langle \Xi_{\alpha}^t(\tau) \Xi_{\alpha}^t(\tau') \rangle = 6k_B T \Gamma \delta_{\alpha\beta} \delta(\tau - \tau') / T_{ch}, \quad (\alpha, \beta = x, y, z) \quad (5.21)$$

$$\langle \Xi_{\alpha}^{\gamma}(\tau) \Xi_{\beta}^{\gamma}(\tau') \rangle = 12k_B T \Gamma \delta_{\alpha\beta} \delta(\tau - \tau') / T_{ch}, \quad (\alpha, \beta = \varphi, \theta) \quad (5.22)$$

Сравнивая характерные времена T_{ch} и T_{ch1} для реальных магнитных материалов, можно прийти к выводу, что

$$T_{ch} \gg T_{ch1} \quad (5.23)$$

Например для магхемита ($\gamma - \text{Fe}_2\text{O}_3$) с намагниченностью $\mu = 3.1 \cdot 10^5$ А/м и плотностью $D = 5 \cdot 10^3$ кг/м³ при размере частиц $R = 10$ нм, используя (5.12), получим $T_{ch} = 9.942 \cdot 10^{-10}$, в то время как с учетом (5.13) $T_{ch1} = 4.376 \cdot 10^{-18}$. Данный факт позволяет исключить из рассмотрения флуктуационную магнитную динамику, описываемую уравнением (5.20).

Даже если в результате взаимодействия с термостатом магнитный момент отклонится от своего равновесного положения, которое практически полностью определяется магнитокристаллической анизотропией, процесс релаксации обратно произойдет за время очень незначительного механического перемещения частицы как целого. Другими словами, во временном масштабе механического движения можно пренебречь существенными флуктуациями магнитного момента внутри частицы.

Далее, в предположении, что дипольные и внешние поля много меньше эффективного поля анизотропии, что достаточно распространено в практике, можно пользоваться так называемой моделью наночастицы с замороженным магнитным моментом [61]. Здесь полагается, что магнитный момент всегда сориентирован вдоль оси анизотропии и все его повороты осуществляются путем поворота наночастицы как целого.

5.2 Технологии численного моделирования

5.2.1 Параллельные вычисления с использованием графических процессоров (GPU)

Моделирование феррожидкости в рамках описанной выше модели, по сути, является задачей многих тел (N -body problem), которая решается численно. К такому классу задач относятся также системы с гравитационным взаимодействием, системы электронов и пр. Проблемой, которая сопутствует моделированию таких ансамблей, является время счета, которое пропорционально квадрату числа элементов (N^2). Этот факт делает практически невозможным моделирование систем из большого числа элементов с применением даже очень мощных персональных компьютеров. Время счета можно уменьшить, применив традиционные распределенные вычисления, например, с использованием кластеров или суперкомпьютеров. Однако, такое решение имеет ограничения экономического характера, поскольку указанные системы достаточно дорогостоящие и затратные в обслуживании.

Альтернативой к такому подходу может быть использование графических процессоров (GPU – Graphic Processor Unit). Графические процессоры представляют собой комплекс одинаковых модулей (т.н. ядер), выпол-

ненных на одном кристалле, каждый из которых предназначен для выполнения ограниченного набора математических операций. Изначально данные устройства применяются для высокоскоростных расчетов, необходимых для реалистичного отображения трехмерных объектов в режиме реального времени, поэтому GPU широко применяются в видеоадаптерах (или видеокартах) персональных компьютеров. Рост степени детализации изображений тесно связан с ростом объемов вычислений, что постоянно стимулирует рост производительности GPU. В свою очередь, рост производительности обеспечивается за счет увеличения числа ядер GPU. Поэтому, современные видеокарты содержат сотни и даже тысячи ядер [122] и обеспечивают вычислительную мощность на порядок выше, чем у специализированных центральных процессоров (ЦПУ).

Изначально архитектура GPU ориентирована на выполнение параллельных вычислений, что и послужило причиной использования GPU в задачах, не связанных с отображением графики, но требующих большого объема вычислений — т.н. общих расчетах. До недавнего времени создание программных реализаций, использующих возможности GPU, требовало специальных навыков и знаний. Однако, после выхода технологии Compute United Device Architecture (CUDA), продукта известного производителя видеокарт — компании NVIDIA, ситуация существенно упростилась [123]. Теперь организовать высокопроизводительные параллельные вычисления можно с использованием распространенных языков программирования, таких как C/C++ или Fortran.

Все вышесказанное, совместно с относительной дешевизной видеокарт, привело к тому, что в настоящее время выполнение общих расчетов на графических процессорах является очень быстро развивающимся направлением в области высокопроизводительных вычислений. Так, например из 500 самых мощных суперкомпьютеров мира 52 используют именно GPU [124].

5.2.2 All-Pair алгоритм

Самый простой подход к распространению системы из N взаимодействующих частиц является подсчет взаимодействия между всеми парами. Именно наличие двойного перебора и приводит к зависимости времени счета как N^2 . Такой алгоритм еще называют All-Pairs (AP) алгоритм. Он достаточно медленный, особенно, когда выполняется на CPU, поэтому, как правило, используется для системы не более чем из $N = 10^2 - 10^3$ частиц. Выполнение данного алгоритма в параллельном режиме с использованием GPU дает существенны выигрыш, при этом нужно заметить, что идеология AP алгоритма хорошо адаптирован к архитектуре CUDA [125].

Каждый шаг интегрирования стандартного алгоритма AP выполняется в два этапа. Они состоят в следующем.

- 1 Расчет изменения позиций частиц и направления магнитных моментов.
- 2 Обновление позиций частиц и направлений магнитных моментов.

Эта структура остается неизменной в GPU-версии алгоритма с той лишь разницей, что вычислительные задачи распределяются между ядрами GPU. Ядра ответственные за первый этап вычисляют силы и моменты сил, действующих на частицы, а также соответствующие приращения координат частиц и магнитных моментов, согласно формулам (5.14), (5.17), (5.18). Инкременты затем записываются в глобальную память. Второй этап состоит в обновлении состояний частиц с полученным шагом. Здесь существует проблема глобальной синхронизации т.н. нитей — вычислительных последовательностей — принадлежащих к различным блокам после каждого этапа, начиная с этапа выполнения на отдельных ядрах, при условии, что информация о состоянии системы хранится в общей памяти.

Каждая нить отвечает за одну частицу ансамбля, и таким образом, она должна подсчитать силы и моменты сил, действующие на частицы остальной части ансамбля. Чтобы ускорить вычислительный процесс мы храним вектор данных из нити частиц в общей памяти, а также информацию о других частицах, необходимую для вычисления соответствующих сил взаимодействия. Таким образом, мы имеем два набора массивов данных в глобаль-

ной памяти, а именно:

- 1 Данные частиц, назначенные нитям блока.
- 2 Данные частиц для вычисления их взаимодействия.

Необходимые данные представляют собой координаты частиц и проекции их векторов магнитных моментов на оси x , y и z . Размеры массивов равны числу нитей на блок. Первый набор данных является постоянным в течение одного шага интегрирования, но второй набор изменяется. Так, в начале мы загружаем информацию о координатах и моментах частиц во второй набор массивов в общей памяти. После вычисления сил и моментов сил действующих на блок частиц, процедура повторяется, т. е. информацию о другом наборе частиц записывается во второй набор массивов и соответствующие взаимодействия вычисляются.

Преимущество описанного подхода является то, что он использует глобальную память наиболее оптимальным способом. Доступ к памяти объединенный и нет конфликта банка общей памяти. Для ансамбля $N = 10^4$ частиц это приводит к загрузке GPU на 97.7 процентов.

5.2.3 Применение алгоритма Барнса-Хата

All-Pairs алгоритм прост и понятен для реализации на GPU и имманентен технологии CUDA. Но, как уже отмечалось, этот алгоритм является чисто масштабируемым: соответствующее время вычислений растет как $O(N^2)$, и его выполнение требует неоправданно много времени уже для ансамбля из 10^5 частиц.

Существенного ускорения счета можно добиться за счет использования приближенных алгоритмов расчета попарного взаимодействия частиц. В силу обратной пропорциональности величины дипольного поля к третьей степени расстояния, см. (5.19)), существенные корреляции направлений магнитных моментов будут наблюдаться лишь для наночастиц, расположенных достаточно близко друг к другу. В то же время, если некоторая локализованная группа частиц достаточно удалена от выбранной, то нет необходимости в детальном расчете попарного взаимодействия выбранной

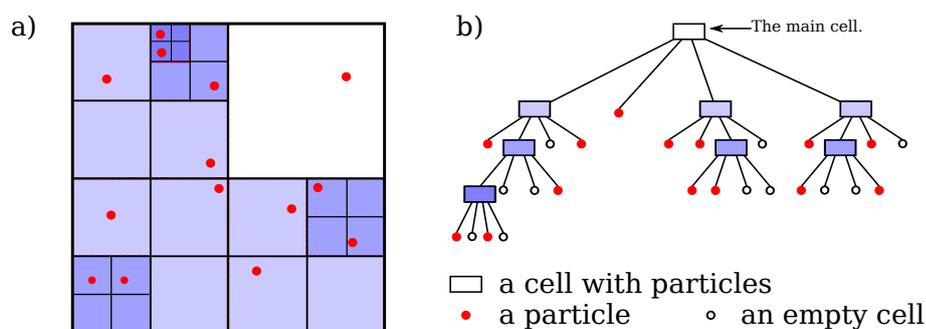


Рисунок 5.1 — Иерархическая декомпозиция Барнса-Хата в двумерном пространстве и соответствующее октодерево

частицы с каждой из группы. Можно действие группы частиц заменить на действие псевдочастицы, размещенной в геометрическом центре группы и обладающей магнитным моментом, равным среднему по всей группе.

Данная идея вместе с интуитивно понятным рекурсивным алгоритмом впервые была предложена для моделирования эволюции космических объектов, таких как звезды и галактики, где взаимодействие происходит имеет гравитационный характер [126], и получила название алгоритм Барнса-Хата (Barnes-Hut algorithm, BH). Здесь разбиение частиц на группы происходит путем деления пространства на кубические ячейки с последующим делением каждой из них на восемь равных кубических под-ячеек до тех пор, пока каждая такая ячейка, не зависимо от размера, будет содержать не более одной частицы. При расчете взаимодействия выбранной частицы с остальными, проверяется угловой размер кубических ячеек относительно местоположения выбранной частицы от самых больших до наименьших. Если угловой размер некоторой ячейки достаточно мал, то считается взаимодействие между выбранной частицей и псевдочастицей, соответствующей всей ячейке. В противном случае, последовательно анализируются все восемь под-ячеек, которые образуют выбранную ячейку. Время счета при этом растет уже не как N^2 , а как $N \cdot \log N$, что дает существенный выигрыш для ансамблей из тысяч и десятков тысяч частиц. Упрощенная двумерный реализация этого алгоритма в общих чертах представлена на Рис. 5.1.

Силы, действующие на k -ю частицу могут быть рассчитаны путем обхода октодерева. Если расстояние от частицы к псевдо-частице, что соответствует основной ячейке, является достаточно большим, рассчитывается влияние этой псевдо-частицы на k -ю частицу, в противном случае, прове-

ряются псевдо-частицы из следующих субэлементов, и так далее (иногда эта процедура может привести в конце к ветке только с одной частицей в ячейке слева). Эти вычисленные силы затем добавляются к результирующей силе, действующей на k -ю частицу.

Чтобы построить октодеревя на CPU, используются, как правило, множество — т.н. «куча» объектов. Эти объекты содержат: указатель-потомок и поля данных, а также их детей распределяющихся динамически. Чтобы избежать сложного и ресурсоемкого динамического распределения и доступа к объектам «кучи», должна быть использована структура данных на основе массива. Поскольку у нас есть несколько массивов, ответственных за переменные, появляется возможность объединения обращений к глобальной памяти. Частицы и ячейки могут иметь одинаковые поля данных, например, позиции. В этом случае используются массивы.

В отличие от All-Pairs алгоритма, где используются только два ядра, оригинальный алгоритм GPU ВН имеет шесть ядер [127]:

- 1 Ядро определения ограничительной области.
- 2 Ядро построения октодеревя.
- 3 Вычисление геометрического центра и полного магнитного момента каждой ячейки.
- 4 Сортировка частиц по позиции.
- 5 Вычисление силы и поля, действующих на каждую частицу.
- 6 Ядро интегрирования.

Ядро 1 определяет границы основной ячейки. Хотя ансамбль ограничивается контейнером и частицы не могут выйти наружу, мы все равно используем это ядро для упрощения алгоритмизации. Размер основных ячеек может быть значительно меньшим характерного размера контейнера. Кроме того, время вычислений этого ядра очень мало, обычно намного меньше 1 процента от общего времени одного шага интегрирования. Идея этого ядра найти минимальное и максимальное значение позиции частицы. Здесь мы используем атомарные операции и встроенные `min` и `max` функции.

Ядро 2 выполняет иерархическое разложение основной ячейки и строит октодереву в трехмерном случае. Как и в последующих ядрах, частицам циклически присваиваются нити. Когда частице присвоилась нить, она пытается заблокировать соответствующий указатель-потомок. В случае успеха, нить переписывает указатель-потомок и снимает блокировку. Для выполнения легкой блокировки, которая используется, чтобы избежать доступа к одной и той же части массива дерева несколькими нитями, должны участвовать атомарные операции. Чтобы синхронизировать процесс построения дерева, мы используем `syncthreads` барьер.

Ядро 3 вычисляет магнитные моменты и позиции псевдо-частиц, связанных с ячейками путем обхода несимметричного октодерева снизу вверх. Нить проверяет, вычислен ли магнитный момент и геометрический центр всех подъячеек присвоенных ячейке. Если нет, то нить обновляет вклад готовых ячеек и ждет результатов от остальной части суб-ячеек. В противном случае вычисляется вклад всех суб-ячеек.

Ядро 4 сортирует частицы в соответствии с их положением. Этот шаг может ускорить производительность следующего ядра из-за оптимального доступа к глобальной памяти.

Ядро 5 сначала вычисляет силы и моменты сил, действующие на частицы, а затем вычисляет соответствующие приращения. Потом, для того, чтобы вычислить силу и дипольное поле, действующее на частицу, проходится октодереву. Чтобы свести к минимуму расхождение нитей, очень важно, чтобы пространственно близкие частицы принадлежат к одной и той же основе (направлению ветвления). В этом случае последующие нити пройдут через примерно те же ветви деревьев. Это уже было обеспечено ядром 4. Необходимые данные для расчета взаимодействия будут выбраны в общей памяти по первой нити основы. Это позволяет уменьшить количество обращений к памяти.

Наконец, ядро 6 обновляет состояние частиц с помощью приращения позиции, и переориентирует магнитный момент частицы. Вышеописанный алгоритм имеет много преимуществ. Среди них: минимальное расхождение нитей и полное отсутствие GPU/CPU передачи промежуточных данных, а передается только финальный результат; оптимальное использование гло-

бальной памяти с минимальным количеством обращений, поле данных повторного использования и минимальное количество блокировок. Все это и позволяет нам достигнуть существенного ускорения времени счета.

Заметим, что еще большего ускорения расчетов можно добиться используя так называемый быстрый мультипольный метод (fast multipole method) [128]. В рамках данной техники время вычислений пропорционально N . В отличие от описанного алгоритма Барнса-Хата, где считается взаимодействие либо между частицей и частицей, либо между частицей и группой частиц, здесь взаимодействие считается сразу между группами частиц. Однако, несмотря на очевидный выигрыш во времени, остается открытым вопрос о корректности учета корреляций магнитных моментов частиц в процессе образования их кластеров различной конфигурации при использовании быстрого мультипольного метода. Поэтому в данной работе мы остановились именно на алгоритме Барнса-Хата.

5.2.4 Верификация и предварительные численные результаты

Предложенная модель вместе с описанной технологией параллельных вычислений была реализована в программном коде на языке C++. С помощью написанной программы можно не только задавать различные внешние и внутренние параметры ансамбля и считать усредненные характеристики, но и визуализировать динамику наночастиц в жидкости. Моделирование проведено на (I) ПК с Intel Xeon X5670 @ 2.93 ГГц (48 Гб RAM) и (II) GPU Tesla M2050. Хотя процессор имеет шесть ядер, только одно ядро используется в моделировании. Эти программы были скомпилированы с помощью NVCC (версия 4.0) и GCC (версия 4.4.1) компиляторов. Поскольку не было никакой необходимости для высокоточных расчетов мы использовали переменные (float) с одинарной точностью и составил программу с ключом `-use-fast-math`. Мы также использовали `-O3` флаг оптимизации для ускорения нашей программы. Наконец, был использован метод численного интегрирования стохастических дифференциальных уравнений Эйлера-Мураемы с шагом по времени $\Delta\tau = 0.001$ для уравнений (5.14), (5.17), (5.18).

Мы рассчитали время расчета одного шага интегрирования для обо-

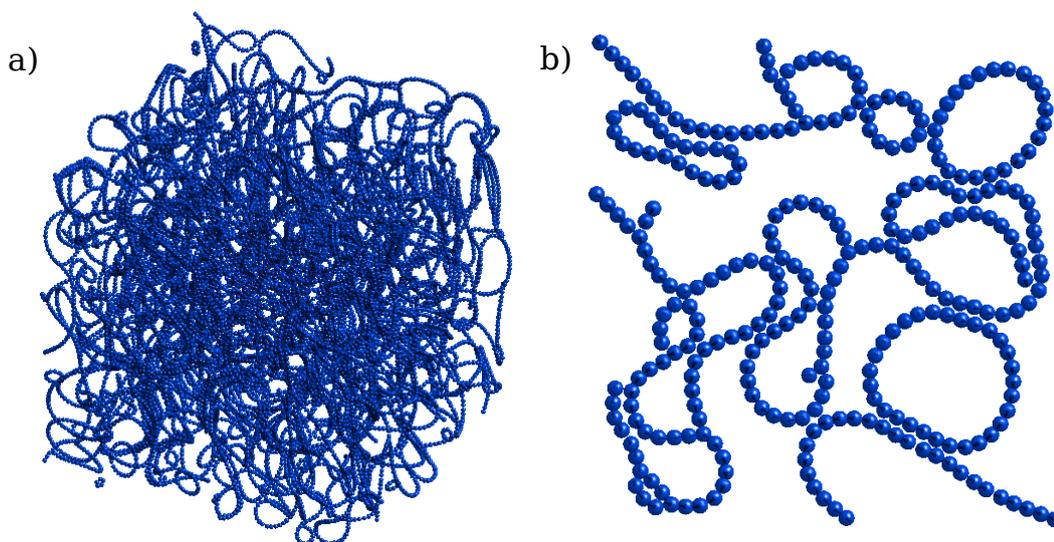


Рисунок 5.2 — Снимки ансамблей из N -частиц, полученные с помощью алгоритма Барнс-Хата: (a) $N = 20000$ (кубический сосуд с длиной ребра $L = 150R$) и (b) монослой из $N = 300$ частиц. Параметры $\Gamma_r = \Gamma_d = 0.1$, $T = 300$ К, $\mu = 3.1 \cdot 10^5$ А/м, $D = 5000$ кг/м³, $R = 10$ нм.

их алгоритмов в зависимости от N . Результаты представлены в Таблице 1. Преимущества GPU вычислений возрастают с увеличением числа частиц. Для ансамбля $N = 10^6$ частиц, ускорение получившееся от использование алгоритма Барнса-Хата составляет почти в 300 раз по сравнению с выполнением оптимизированного All-Pairs алгоритма на том же GPU. Тем не менее, для $N = 10^3$, All-Pairs алгоритм работает лучше. Это связано дополнительными расчетами на построения дерева, которые в сумме перевешивают эффект ускорения для небольшого числа частиц. Стоит отметить, что на сегодня $N = 10^3$ — типичный масштаб моделирования феррожидкостей [119, 129].

Рис. 5.2 показывает мгновенные конфигурации, полученные в ходе моделирования для кубического объема и для монослоя. Для имитации монослоя частиц, мы используем прямоугольный параллелепипед высотой $2.1R$. Параметры моделирования соответствуют режиму, когда средняя дипольная энергия гораздо больше, чем энергия тепловых колебаний. Здесь четко видно формирование цепочных крупномасштабных кластеров [120]

N	AP_{CPU}	AP_{GPU}	BH_{GPU}	$\frac{AP_{CPU}}{AP_{GPU}}$	$\frac{AP_{CPU}}{BH_{GPU}}$	$\frac{AP_{GPU}}{BH_{GPU}}$
10^3	34	0.7	2	49	17	0.35
10^4	3 470	20	6.5	174	534	3.1
10^5	392 000	1 830	54	214	7 259	33.9
10^6	39 281 250	184 330	621	213	63 214	297

Таблица 2 – Продолжительность одного шага интегрирования (мс) для оптимизированного All-Pairs алгоритма реализованного на CPU (AP_{CPU}) и GPU (AP_{GPU}), и для CPU-ориентированного (BH_{CPU}) и GPU-ориентированного (BH_{GPU}) алгоритма Барнса-Хата.

5.3 Результаты и анализ проведенных исследований

Далее приводятся результаты моделирования ансамбля из $N = 10^4$ частиц магхемита ($\gamma - \text{Fe}_2\text{O}_3$) со следующими параметрами $\mu = 3.1 \cdot 10^5$ А/м, $D = 5000$ кг/м³, $R = 10$ нм., которые взвешены в воде ($h = 0.89 \cdot 10^{-3}$ Па·с). Считалось, что ансамбль находится в цилиндрическом сосуде, высота которого в пять раз превышает диаметр, если специально не оговорено иное. Ось oz декартовой системы координат направлена вдоль высоты сосуда. Параметры в выражении (5.16) принимались равными $\sigma = 2.1$, $\epsilon = 0.005$, температура принималась равной $T = 300$ К, если специально не оговорено иное. Равновесное состояние для заданных параметров находилось на протяжении $3 \cdot 10^4$ итераций, при этом усредненные характеристики рассчитывались по последним $2 \cdot 10^4$ итерациям [131].

Интенсивность дипольного взаимодействия зависит от среднего расстояния между частицами, которое тем меньше, чем больше объемное содержание частиц

$$\phi = \frac{4\pi R^3 N}{3V_f} \cdot 100\% \quad (5.24)$$

где V_f – объем жидкости.

При условии $f \rightarrow 0$, среднее значение приведенной намагниченности $\langle u_i \rangle$ вдоль i -ой координатной оси описывается функцией Ланжевена [110]

$$\langle u_i \rangle = \coth \alpha - 1/\alpha, \alpha = \mu_0 m H_i^{ext} / k_B T \quad (5.25)$$

где H_i^{ext} — внешнее поле вдоль i -ой оси.

На рис. 5.3а показаны зависимости приведенной намагниченности от внешнего поля для различных объемных содержаний частиц. Как видно из рисунка, результатом взаимодействия, как правило, увеличение намагниченности по сравнению со случаем без взаимодействия. Это связано с тем, что дипольное поле частиц, магнитные моменты которых сориентированы преимущественно вдоль внешнего поля, совпадает с последним по направлению, чем усиливает его. В результате в равновесном состоянии для данных условий моделирования частицы образуют линейные цепочки (см. рис 5.3, а). Однако, с ростом f для не слишком больших внешних полей может сказываться антиферромагнитный характер дипольного взаимодействия, при котором результирующее направление расположенных рядом цепочек может быть противоположным. Кроме того, большая концентрация частиц может обуславливать образование замкнутых кольцеобразных кластеров (см. рис 5.3, б). Все это приводит к уменьшению намагниченности ансамбля. Поэтому, с ростом ϕ намагниченность ансамбля растет медленнее, что выражается в более пологой зависимости дифференциальной магнитной восприимчивости ансамбля

$$\chi_z = \frac{\Delta \langle u_z \rangle}{\Delta h_z^{ext}}, \quad (5.26)$$

см. рис. 5.3б. Следует отметить, что описанный механизм может приводить к тому, что рассчитанное значение приведенной намагниченности может быть меньше, чем предсказанное выражением (5.25).

В случае, когда тепловая энергия не превышает магнитостатическую энергию, обусловленную дипольным взаимодействием, роль тепловых эффектов незначительна. Количественным критерием, выражающим это, является отношение энергии взаимодействия двух рядом расположенных частиц к тепловой

$$\Lambda = \frac{\mu_0 m^2}{16\pi R^3 k_B T} \quad (5.27)$$

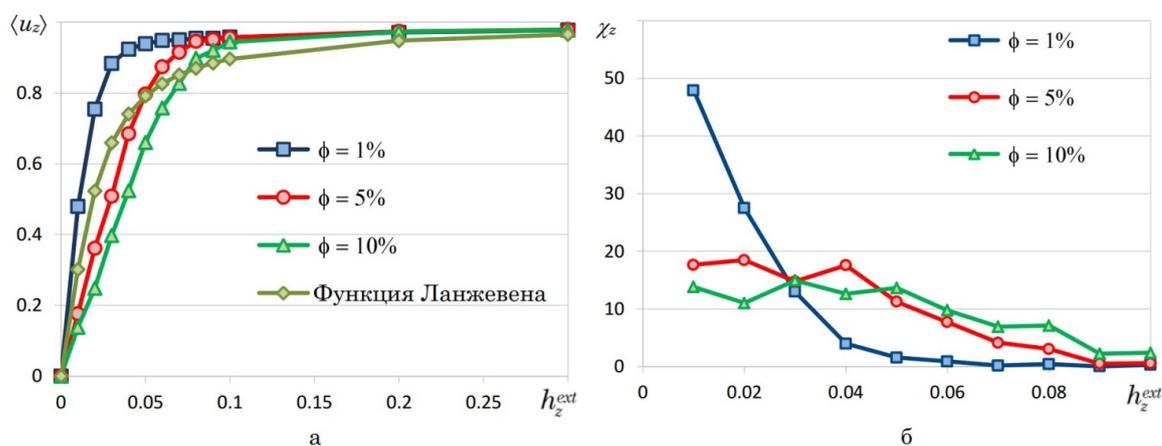


Рисунок 5.3 — Влияние объемной доли наночастиц в феррожидкости на ее намагниченность (а) и восприимчивость (б)

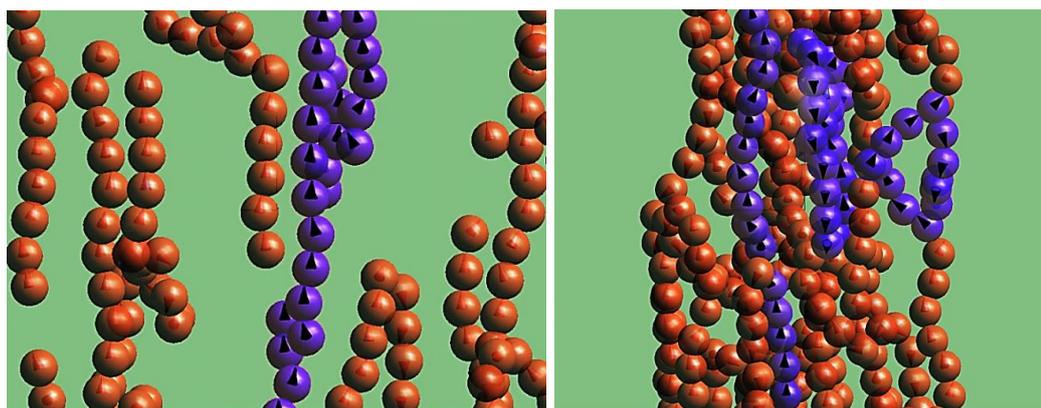


Рисунок 5.4 — Характерная структура частиц в жидкости при $\phi = 1\%$ (а) и $\phi = 5\%$ (б)

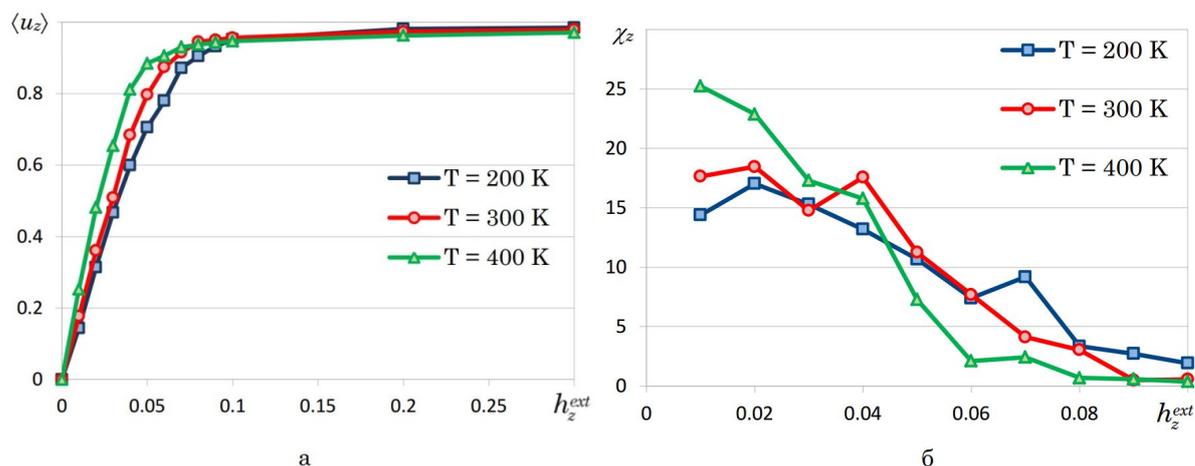


Рисунок 5.5 — Влияние температуры термостата на намагниченность (а) и восприимчивость (б) феррожидкости, $\phi = 5 \%$

Известно [120], что если выполняется условие $\Lambda \ll 1$, частицы претерпевают броуновское движение, в противном случае, они образуют кластеры, определяющие структуру феррожидкости. Используя выражение (5.27), не трудно показать, что для используемых параметров моделирования в диапазоне температур 200-400 К, параметр Λ приобретает значения 1.91-0.955. Поэтому, различие кривых намагничивания для этих температур наблюдаются лишь для малых значений внешнего поля (см. рис. 5.5 а). Поскольку с увеличением температуры затрудняется объединение частиц в кластеры, отклик на внешнее поле становится более выраженным, что приводит к росту восприимчивости с температурой (см. рис. 5.5 б). Для больших полей, когда приведенная намагниченность стремится к единице, тепловые флуктуации стремятся разупорядочить ансамбль. Это обуславливает незначительное уменьшение намагниченности с ростом температуры, когда $\langle u_z \rangle \approx 1$ (см. рис. 5.5 а).

Особенностью дипольного взаимодействия состоит в том, что оно приводит к взаимному притяжению между частицами. В то же время, за счет специальных покрытий частиц происходит отталкивание, которое моделируется с помощью потенциала Леннарда-Джонса. Одним из основных феноменологических параметров в указанном потенциале, является расстояние σ , на котором сила притяжения компенсируется силой отталкивания. Рост этого параметра приводит к уменьшению роли дипольного взаимодействия, поскольку увеличивается среднее расстояние между частицами и об-

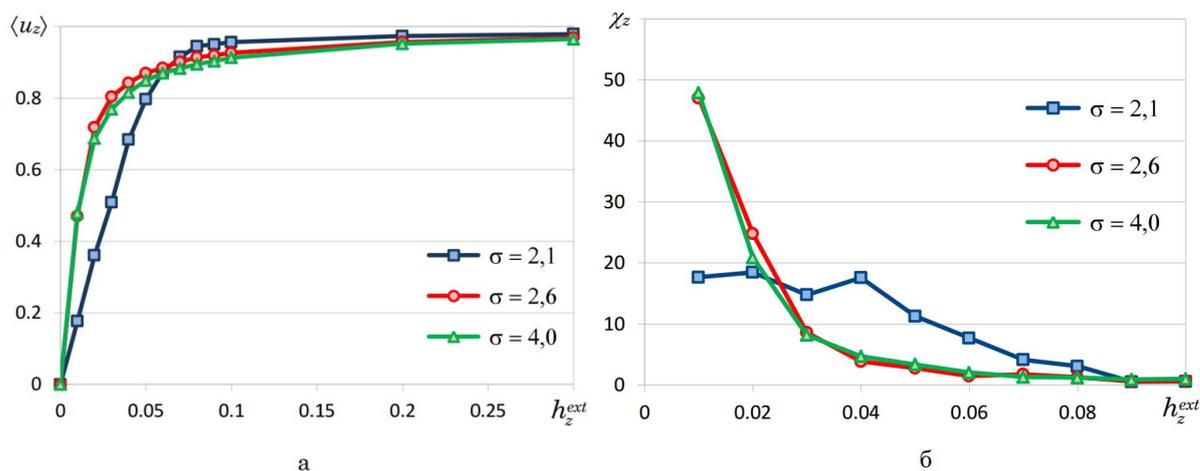


Рисунок 5.6 — Влияние параметра σ в потенциале Леннарда-Джонса на намагниченность (а) и восприимчивость (б) феррожидкости, $f = 5\%$

разование стабильных кластеров затрудняется. Как следствие, это приводит к росту восприимчивости (см. рис. 5.6 б), как и в случае роста температуры. Для достаточно больших внешних полей, когда $\langle u_z \rangle \approx 1$, дипольное поле усиливает внешнее, поэтому выполняется условие $\langle u_z(\sigma_1) \rangle > \langle u_z(\sigma_2) \rangle$, если $\sigma_1 > \sigma_2$ (см. рис. 5.6 а).

За счет наличия внутренней структуры феррожидкость может демонстрировать зависимость свойств от формы сосуда, а также анизотропию свойств, обусловленную форм-фактором. Если, не изменяя общего объема сосуда и количества частиц, изменять соотношение между ортогональными линейными размерами, в системе будут наблюдаться две взаимоисключающие тенденции. С одной стороны, увеличение одного линейного размера будет способствовать образованию цепочек вдоль этого направления. В результате приведенная намагниченность (см. рис. 5.7 а), увеличивается с ростом отношения «высота : диаметр» ($l : d$). При этом восприимчивость (см. рис. 5.7 б) с ростом $l : d$ демонстрирует более сильную зависимость от внешнего поля с простом величины χ_z для малых внешних полей и, наоборот, более слабую для больших. Однако, вследствие уменьшения среднего расстояния между цепочками, растет вероятность антиферромагнитного упорядочения таких цепочек, что препятствует дальнейшему увеличению отличия зависимостей $\langle u_z(h_z^{ext}) \rangle$ и $\langle \chi_z(h_z^{ext}) \rangle$ с ростом отношения $l : d$.

За счет того, что наночастицам энергетически выгодно образовывать цепочки именно вдоль наибольшего линейного размера, будет наблюдаться-

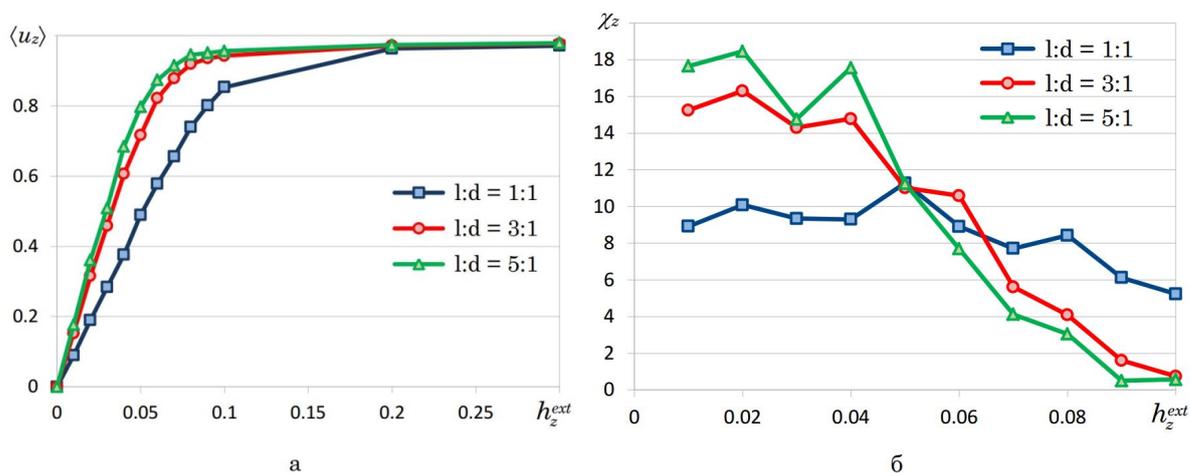


Рисунок 5.7 – Влияние форм-фактора на намагниченность (а) и восприимчивость (б) феррожидкости, $\phi = 5\%$

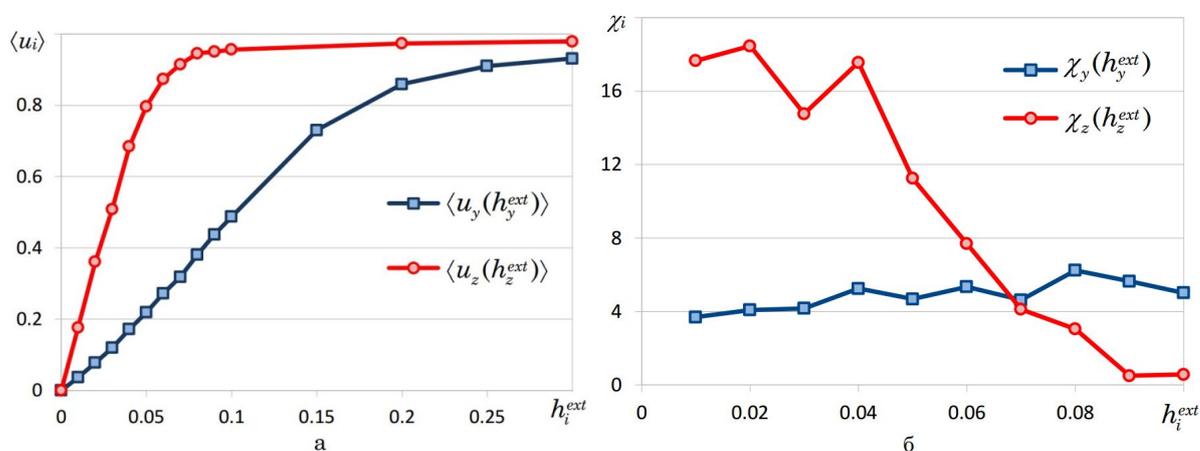


Рисунок 5.8 – Анизотропия свойств феррожидкости в вытянутом сосуде: намагниченность (а) и восприимчивость (б) феррожидкости, $l : d = 1 : 5$, $\phi = 5\%$

ся анизотропия его магнитных свойств. Если внешнее поле прикладывается вдоль цепочки, то за счет со-направленного с ним дипольного поля упорядочение магнитных моментов происходит достаточно интенсивно, о чем свидетельствует быстрый рост кривой намагничивания $\langle u_z(h_z^{ext}) \rangle$ (см. рис. 5.7 а). В то же время, степень отклика вдоль ортогонального направления значительно ниже, что выражается как в более пологой кривой намагничивания $\langle u_y(h_y^{ext}) \rangle$, так и в более слабой зависимости восприимчивости от внешнего поля (см. рис. 5.8 б).

Другое проявление анизотропии свойств состоит в несовпадении проекций намагниченности на взаимно перпендикулярные координатные оси при действии вдоль них одинаковых постоянных полей. Если вдоль более

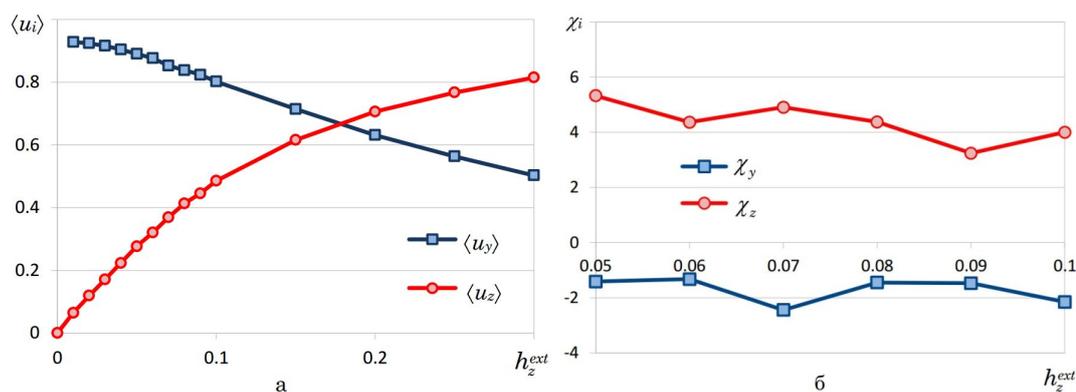


Рисунок 5.9 — Анизотропия магнитных свойств при взаимно перпендикулярном воздействии внешних полей: намагниченность (а) и восприимчивость (б) феррожидкости, $l : d = 1 : 5$, $\phi = 5 \%$

короткой стороны сосуда приложить некоторое внешнее поле ($h_y^{ext} = 0.3$ на рисунке 5.9), а поле вдоль длинной стороны (h_z^{ext}) постепенно изменять, проекция намагниченности $\langle u_y \rangle$ будет нарастать с большей скоростью, чем спадать проекция $\langle u_z \rangle$ (см. рис. 5.9 б). В результате, когда обе проекции поля выровняются ($h_y^{ext} = h_z^{ext} = 0.3$), выполняется условие $\langle u_y \rangle < \langle u_z \rangle$.

5.4 Выводы к разделу 5

В данной работе представлены результаты моделирования ферромагнитной жидкости методом молекулярной динамики. Для увеличения скорости вычисления проводились с помощью графических процессоров, а программная реализация была выполнена с использованием технологии CUDA. Ключевой особенностью численного моделирования явилось применение алгоритма Барнса-Хата (Barnes-Hut algorithm) для расчетов межчастичного взаимодействия, что позволило моделировать динамику ансамбля из 10^4 частиц, используя обычный персональный компьютер с бюджетным видеоадаптером.

Главной целью исследований было установление влияния взаимодействия между частицами на равновесные свойства феррожидкости. Было показано, что в данном вопросе ключевая роль принадлежит структуре жидкости, которая, в свою очередь, формируется за счет дипольного взаимодействия. Показано, что процесс кластеризации, имеющий своим результатом ту или иную структуру исследуемой среды, зависит от ряда факторов,

таких как объемное содержание частиц, характеристики дополнительных сил отталкивания, обеспечиваемых за счет покрытия наночастиц сурфактантами, температуры, а, также форм-фактор сосуда.

При не слишком большом объемном содержании частиц они выстраиваются в цепочки и дипольное поле усиливает внешнее, что приводит к росту восприимчивости по сравнению со случаем отсутствия взаимодействия. С дальнейшим ростом содержания частиц за счет возможности образования кольцеобразных кластеров или антиферромагнитного упорядочения рядом расположенных цепочек, начинает преобладать тенденция к уменьшению степени отклика среды на внешнее поле, и зависимость восприимчивости от внешнего поля становится более слабой. Описанные тенденции могут быть существенно усилены, если поместить ансамбль в узкий сосуд, что позволяет говорить об анизотропии, обусловленной форм-фактором сосуда, что не наблюдается в случае, когда взаимодействие мало.

Если намагниченность системы не выходит на насыщенный уровень, восприимчивость демонстрирует рост с температурой, поскольку тепловые флуктуации препятствуют кластеризации, снижающей степень отклика ансамбля на внешнее поле. Если же намагниченность близка к насыщенной, за счет тепловых флуктуаций восприимчивость наоборот, уменьшается.

Рост силы отталкивания между частицами повышает среднее расстояние между ними, что, в свою очередь, ослабляет влияние корреляций направлений магнитных моментов и затрудняет образование устойчивых кластеров. Поэтому с ростом параметра σ растет крутизна зависимости восприимчивости от внешнего поля с достаточно большими ее значениями при малых внешних полях и быстрым асимптотическим приближением к нулю при выходе намагниченности на насыщение.

ВЫВОДЫ

В ходе выполнения НИР получены аналитические и численные результаты, касающиеся изучения (1) явления аномальной диффузии и релаксации, (2) особенностей динамики намагниченности в металлических наночастицах, (3) эффектов, индуцированных шумом Пуассона и (4) магнитных и структурных свойств ферромагнитных жидкостей.

В разделе 1 всесторонне изучены непрерывные во времени случайные блуждания (CTRW), характеризующиеся тяжелыми плотностями вероятности величины скачка частицы и сверхтяжелыми плотностями времени ожидания между последовательными скачками. В частности, на основе этого формализма построена теория сверхмедленной диффузии широкого круга стохастических систем. Также CTRW-подход применен в разделе 2 для описания медленной и сверхмедленной релаксации двухуровневых систем, чьи структурные элементы подчинены дихотомическому процессу.

В разделе 3 с помощью решения уравнений Максвелла получено эффективное уравнение Ландау-Лифшица-Гильберта для описания динамики намагниченности проводящих ферромагнитных наночастиц. Так в разделе получены соотношения, показывающие влияние вихревых токов на динамику намагниченности наночастицы, изучен эффект прецессионного переключения намагниченности под действием внешнего магнитного поля и рассмотрена проблема диссипации энергии в системах диэлектрических и металлических наночастиц.

В разделе 4 разработаны аналитические и численные методы расчета статистических характеристик систем (в том числе систем ферромагнитных наночастиц), возмущенных пуассоновским шумом. А именно, получено уравнение для распределения магнитного момента однодоменной частицы в случайном магнитном поле, компоненты которого характеризуются свойствами белого шума Пуассона.

И, наконец, в разделе 5 на основе алгоритма Барнса-Хата предложен модифицированный метод молекулярной динамики для моделирования поведения большого количества ферромагнитных наночастиц, которые находятся в вязкой среде. В результате подробно изучено влияние взаимодей-

ствия между частицами, характеристик среды и форм-фактора сосуда на равновесные свойства феррожидкостей. Подобные задачи решаются с помощью использования суперкомпьютеров, нами же был применен подход, позволяющий проводить вычисления на обычном персональном компьютере, оснащённом графическим процессором Nvidia с поддержкой технологии CUDA. При этом стоимость единицы времени работы такого компьютера несоизмеримо меньше, чем работы суперкомпьютера.

ПЕРЕЧЕНЬ ССЫЛОК

1. H. Scher, E. W. Montroll. Anomalous transit-time dispersion in amorphous solids // *Phys. Rev. B* – 1975. – Vol. 12. – P. 2455-2477.
2. R. Metzler, J. Klafter. The random walk's guide to anomalous diffusion: A fractional dynamics approach // *Phys. Rep.* – 2000. – Vol. 339. – P. 1-77.
3. D. ben-Avraham, S. Havlin. *Diffusion and Reactions in Fractals and Disordered Systems*. – Cambridge: Cambridge University Press. – 2000. – 336 p.
4. R. Klages, G. Radons, I. M. Sokolov. *Anomalous Transport: Foundations and Applications*. – 2008. – Berlin: Wiley-VCH. – 584 p.
5. D. Brockmann, L. Hufnagel, T. Geisel. The scaling laws of human travel // *Nature*. – 2006. – Vol. 439. – P. 462-465.
6. C. Song, T. Koren, P. Wang, A.-L. Barabási. Modelling the scaling properties of human mobility // *Nat. Phys.* – 2010. – Vol. 6. – P. 818-823.
7. E. Scalas, R. Gorenflo, F. Mainardi. Fractional calculus and continuous-time finance // *Physica A*. – 2000. – Vol. 284. – P. 376-384.
8. J. Masoliver, M. Montero, G. H. Weiss. Continuous-time random-walk model for financial distributions // *Phys. Rev. E*. – 2003. – Vol. 67, P. 021112(10).
9. E. Scalas. The application of continuous-time random walks in finance and economics // *Physica A*. – 2006. – Vol. 362. – P. 225-239.
10. J. Masoliver, M. Montero, J. Perelló, G. H. Weiss. The CTRW in finance: Direct and inverse problems with some generalizations and extensions // *Physica A*. – 2007. – Vol. 379. – P. 151-167.
11. A. Helmstetter, D. Sornette. Diffusion of epicenters of earthquake aftershock, Omori law and generalized continuous-time random walk models // *Phys. Rev. E*. – Vol. 66. – P. 061104(24).
12. L. Palatella, P. Allegrini, P. Grigolini, V. Latora, M. S. Mega, A. Rapisarda, S. Vinciguerra. Non-Poisson distribution of the time distances between two consecutive clusters of earthquakes // *Physica A*. – 2004. – Vol. 338. – P. 201-205.

13. E. W. Montroll, G. H. Weiss. Random Walks on Lattices. II // J. Math. Phys. – 1965. – Vol. 6. – P. 167-181.
14. J. Klafter, G. Zumofen. Probability Distributions for Continuous-Time Random Walks with Long Tails // J. Phys. Chem. – 1994. – Vol. 98. – P. 7366-7370.
15. E. Barkai. Fractional Fokker-Planck equation, solution, and application // Phys. Rev. E. – 2001. – Vol. 63, P. 046118(17). E. Barkai. CTRW pathways to the fractional diffusion equation // Chem. Phys. – 2002. – Vol. 284. – P. 13-27.
16. G. Germano, M. Politi, E. Scalas, R. L. Schilling. Stochastic calculus for uncoupled continuous-time random walks // Phys. Rev. E. – 2009. – Vol. 79. – P. 066102(12).
17. J. K. E. Tunaley. Asymptotic solutions of the continuous-time random walk model of diffusion // J. Stat. Phys. – 1974. – Vol. 11. – P. 397-408.
18. M. F. Shlesinger, J. Klafter, Y. M. Wong. Random walks with infinite spatial and temporal moments // J. Stat. Phys. – 1982. – Vol. 27. – P. 499-512.
19. H. Weissman, G. H. Weiss, S. Havlin. Transport properties of the CTRW with a long-tailed waiting-time density // J. Stat. Phys. – 1989. – Vol. 57, No1-2. – P. 301-317.
20. M. Kotulski. Asymptotic Distributions of the Continuous-Time Random Walks: A Probabilistic Approach // J. Stat. Phys. – 1995. – Vol. 81. – P. 777-792.
21. M. M. Meerschaert, H. P. Scheffler. Limit Theorems for Continuous-Time Random Walks with Infinite Mean Waiting Times // J. Appl. Prob. – 2004. – Vol. 41. – P. 623-638.
22. S. Havlin, G. H. Weiss. A new class of long-tailed pausing time densities for CTRW // J. Stat. Phys. – 1990. – Vol. 58, No5-6 – P. 1267-1273.
23. J. Drager, J. Klafter. Strong Anomaly in Diffusion Generated by Iterated Maps // Phys. Rev. Lett. – 2000. – Vol. 84, No26. – P. 5998-6001.
24. A. V. Chechkin, J. Klafter, and I. M. Sokolov. Fractional Fokker-Planck equation for ultraslow kinetics // Europhys. Lett. – 2003. – Vol. 63, No3. – P. 326-332.
25. S. I. Denisov and H. Kantz. Continuous-time random walk theory of

- superslow diffusion // *Europhys. Lett.* – 2010. – Vol. 92, No3. – P. 1-4.
26. S. I. Denisov, H. Kantz, P. Hänggi. Langevin equation with super-heavy-tailed noise // *J. Phys. A: Math. Theor.* – 2010. – Vol. 43. – P. 285004(10).
 27. S. I. Denisov, H. Kantz. Probability distribution function for systems driven by superheavy-tailed noise // *Eur. Phys. J. B.* – 2011. – Vol. 80. – P. 167-175.
 28. S. I. Denisov, H. Kantz. Continuous-time random walk with a superheavy-tailed distribution of waiting times // *Phys. Rev. E.* – 2011. – Vol. 83. – P. 041132(7).
 29. S. I. Denisov, S. B. Yuste, Yu. S. Bystrik, H. Kantz, K. Lindenberg. Asymptotic solutions of decoupled continuous-time random walks with superheavy-tailed waiting time and heavy-tailed jump length distributions // *Phys. Rev. E.* – 2011. – Vol. 84. – P. 061143(7).
 30. S. I. Denisov, Yu. S. Bystrik, H. Kantz. Limiting distributions of continuous-time random walks with superheavy-tailed waiting times // *Phys. Rev. E.* – 2013. – Vol. 87. – P. 022117(13).
 31. S. I. Denisov, Yu. S. Bystrik, H. Kantz. Numerical Simulation of Decoupled Continuous-Time Random Walks with Superheavy-Tailed Waiting Time Distributions // *Proc. NAP* – 2012. – Vol. 1, No4. – P. 04MFPN17.
 32. Золотарев В. М. Одномерные устойчивые распределения (М.: Наука, 1983, 304 с.)
 33. L. B. Korolov, Y. G. Sinai. *Theory of Probability and Random Processes*, 2nd ed. – Springer-Verlag. – 2007. – 358 p.
 34. В. Феллер. Введение в теорию вероятностей и ее приложения, Том 2. (М.: Мир, 1967, 765 с.)
 35. А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И Маричев. *Интегралы и ряды*, Том 1, 2-е изд. (М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002, 632 с.)
 36. L. Debnath, D. Bhatta. *Integral Transforms and their Applications*, 2nd ed. (New York, Chapman & Hall/CRC Press, 2007, 728 p.) (Chap. 8 and App. B-6).
 37. Г. Бейтмен, А. Эрдейи и др. *Таблицы интегральных преобразований*, Том 1. (М.: Наука, 1969, 344 с.)
 38. Г. Бейтмен, А. Эрдейи. *Высшие трансцендентные функции*, Том 1, Ги-

- пергеометрическая функция, функции Лежандра, 2-е изд. (М.: Наука, 1973, 296 с.) (Глава 1).
39. R. B. Paris, D. Kaminski. Asymptotics and Mellin-Barnes Integrals. (Cambridge, Cambridge University Press, 2001, 422 p.) (Eq. (3.3.12)).
 40. A. M. Mathai, R. K. Saxena, H. J. Haubold. The H-Function: Theory and Applications. (New York, Springer, 2010, 268 p.) (Chap. 1).
 41. H. J. Haubold, A. M. Mathai, R. K. Saxena. Mittag-Leffler Functions and Their Applications // J. Appl. Math. – 2011. – Vol. 2011, P. 298628(51).
 42. M. J. Ablowitz, A. S. Fokas. Complex Variables: Introduction and Applications (Cambridge, Cambridge University Press, 2003, 647 p.)
 43. H. B. Dwight. Tables of Integrals and Other Mathematical Data, 4th ed. (New York, Macmillan, 1961, 289 p.)
 44. B. D. Hughes. Random Walks and Random Environments, Vol. 1. (Oxford, Clarendon Press, 1995, 631 p.) (Chap. 5.1.4).
 45. L. Devroye. Non-Uniform Random Variate Generation (New York, Springer-Verlag, 1986, 843 p.) (Chap. 2).
 46. F. Mainardi, Yu. Luchko, G. Pagnini. The Fundamental Solution of the Space-Time Fractional Diffusion Equation // Fract./ Calc./ Appl./ Anal./ – 2001. – Vol. 4, No2. – P. 153-192.
 47. S. Dattagupta. Relaxation Phenomena in Condensed Matter Physics. (Orlando, Academic Press, 1987).
 48. K. C. Kao. Dielectric Phenomena in Solids (San Diego, Elsevier Academic Press, 2004).
 49. R. H. Boyd and G. D. Smith. Polymer Dynamics and Relaxation (Orlando, Cambridge University Press, 2007).
 50. K. L. Ngai. Relaxation and Diffusion in Complex Systems (New York, Springer, 2011).
 51. B. Cowan. Nuclear Magnetic Resonance and Relaxation (Cambridge, Cambridge University Press, 2005).
 52. H. Suhl. Relaxation Processes in Micromagnetics (Oxford, Oxford University Press, 2007).
 53. G. Bertotti, I. Mayergoyz, C. Serpico. Nonlinear Magnetization Dynamics in Nanosystems (Oxford, Elsevier, 2009).

54. R. Sessoli, D. Gatteschi, A. Caneschi, M. A. Novak. Magnetic bistability in a metal-ion cluster // *Nature*. – 1993. – Vol. 365 – P. 141-143.
55. L. Thomas, F. Lioni, R. Ballou, D. Gatteschi, R. Sessoli, B. Barbara. Macroscopic quantum tunnelling of magnetization in a single crystal of nanomagnets // *Nature*. – 1996. – Vol. 383. – P. 145-147.
56. C. Sangregorio, T. Ohm, C. Paulsen, R. Sessoli, D. Gatteschi. Quantum Tunneling of the Magnetization in an Iron Cluster Nanomagnet // *Phys. Rev. Lett.* – 1997. – Vol.78. – P. 4645.
57. A. Caneschi, D. Gatteschi, N. Lalioti, C. Sangregorio, R. Sessoli, G. Venturi, A. Vindigni, A. Rettori, M. G. Pini, M. A. Novak. Cobalt(II)-Nitronyl Nitroxide Chains as Molecular Magnetic Nanowires // *Angew. Chem. Int. Ed.* – 2001. – Vol. 40 - P. 1760.
58. R. Clérac, H. Miyasaka, M. Yamashita, C. Coulon. Evidence for Single-Chain Magnet Behavior in a Mn(III)-Ni(II) Chain Designed with High Spin Magnetic Units: A Route to High Temperature Metastable Magnets // *J. Am. Chem. Soc.* – 2002. – Vol. 124, No43. – P. 12837–12844.
59. H.-L. Sun, Z.-M. Wang, S. Gao. Strategies towards single-chain magnets // *Coord. Chem. Rev.* – 2010. – Vol. 254, No9-10. – P. 1081-1100.
60. J. L. Dormann, D. Fiorani, E. Tronc. Magnetic Relaxation in Fine-Particle Systems // *Adv. Chem. Phys.* – 1997. – Vol. 98, P. 283.
61. William Coffey, Yu. P. Kalmykov, J. T. Waldron. *The Langevin Equation: With Applications in Physics, Chemistry and Electrical Engineering.* (World Scientific Publishing, 1996).
62. W. T. Coffey, Yu. P. Kalmykov. Thermal fluctuations of magnetic nanoparticles: Fifty years after Brown // *J. Appl. Phys.* – 2012. – Vol. 112. – P. 121301.
63. S. I. Denisov, K. N. Trohidou. Fluctuation theory of magnetic relaxation for two-dimensional ensembles of dipolar interacting nanoparticles // *Phys. Rev. B.* – 2001. – Vol. 64. – P. 184433.
64. S. I. Denisov, T. V. Lyutyy, K. N. Trohidou. Magnetic relaxation in finite two-dimensional nanoparticle ensembles // *Phys. Rev. B.* – 2003. – Vol. 67. – P. 014411.
65. P. M. Déjardin. Magnetic relaxation of a system of superparamagnetic

- particles weakly coupled by dipole-dipole interactions // *J. Appl. Phys.* – 2011. – Vol. 110. – P. 113921.
66. S. I. Denisov, T. V. Lyutyy, P. Hänggi, K. N. Trohidou. Dynamical and thermal effects in nanoparticle systems driven by a rotating magnetic field // *Phys. Rev. B.* – 2006. – Vol. 74. – P. 104406.
67. S. I. Denisov, K. Sakmann, P. Talkner, P. Hänggi. Rapidly driven nanoparticles: Mean first-passage times and relaxation of the magnetic moment // *Phys. Rev. B.* – 2007. – Vol. 75. – P. 184432.
68. S. Goldstein. On diffusion by discontinuous movements, and on the telegraph equation. // *Quart. J. Mech. Appl. Math.* – 1951. – Vol. 4. – P. 129.
69. M. Kac. A stochastic model related to the telegrapher's equation // *Rocky Mount. J. Math.* – 1974. – Vol. 4, P. 497.
70. A. D. Kolesnik, N. Ratanov. *Telegraph Processes and Option Pricing.* (Heidelberg, Springer, 2013).
71. S. I. Denisov, M. Kostur, E. S. Denisova, P. Hänggi. Analytically solvable model of a driven system with quenched dichotomous disorder // *Phys. Rev. E.* – 2007. – Vol. 75. – P. 061123; Arrival time distribution for a driven system containing quenched dichotomous disorder // *Phys. Rev. E.* – 2007. – Vol. 76. – P. 031101.
72. C. Godrèche, J. M. Luck. Statistics of the Occupation Time of Renewal Processes // *J. Stat. Phys.* – 2001. – Vol. 104. – P. 489.
73. L. Beghin, L. Nieddu, E. Orsingher. Probabilistic analysis of the telegrapher's process with drift by means of relativistic transformations // *J. Appl. Math. Stoch. Anal.* – 2001. – Vol. 14. – P. 11-25.
74. V. V. Uchaikin. Self-similar anomalous diffusion and Levy-stable laws // *Phys. Usp.* – 2003. – Vol. 46. – P. 821.
75. A. Di Crescenzo. On random motions with velocities alternating at Erlang-distributed random times // *Adv. Appl. Prob.* – 2001. – Vol. 33, No3. – P. 690-701.
76. B. D. Hughes. *Random Walks and Random Environments, Vol. 2.* (Oxford, Clarendon Press, 1995).
77. S. I. Denisov, E. S. Denisova, H. Kantz. Biased diffusion in a piecewise

- linear random potential // *Eur. Phys. J. B.* – 2010. – Vol. 76, No1. – P. 1-11.
78. N. H. Bingham, C. M. Goldie, J. L. Teugels. *Regular Variation* (Cambridge, Cambridge University Press, 1987).
79. W. F. Brown, Jr. The fundamental theorem of fine ferromagnetic particle theory // *J. Appl. Phys.* – 1968. – Vol. 39. – P. 993-994.
80. C. A. Ross. Patterned magnetic recording media // *Ann. Rev. Mat. Res.* – 2001. – Vol. 31. – P. 203–235.
81. A. Moser, K. Takano, D. T. Margulies, M. Albrecht, Y. Sonobe, Y. Ikeda, S. Sun, E. E. Fullerton. Magnetic recording: advancing into the future // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 2002. – Vol. 35. – P. 157–167.
82. A. Kikitsu. Prospects for bit patterned media for high-density magnetic recording // *J. Magn. Magn. Mat.* – 2009. – Vol. 321. – P. 526-530.
83. S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, D. M. Treger. Spintronics: A spin-based electronics vision for the future // *Science.* – 2001. – Vol. 294. – P. 1488-1495.
84. I. Zutic, J. Fabian, S. Das Sarma. Spintronics: Fundamentals and applications // *Rev. Mod. Phys.* – 2004. – Vol. 76. – P. 323-410.
85. Q. A. Pankhurst, J. Connolly, S. K. Jones, J. Dobson. Applications of magnetic nanoparticles in biomedicine // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 2003. – Vol. 36. – P. R167-R181.
86. M. Ferrari. Cancer nanotechnology: opportunities and challenges // *Nat. Rev. Cancer.* – 2005. – Vol. 5. – P. 161-171.
87. V. Labhasetwar, D. L. Leslie-Pelecky. *Biomedical Applications of Nanotechnology* (NewJersey, Wiley NewJersey, 2007).
88. S. Laurent, D. Forge, M. Port, A. Roch, C. Robic, L. Vander Elst, R. N. Muller. Magnetic iron oxide nanoparticles: Synthesis, stabilization, vectorization, physicochemical characterizations, and biological applications // *Chem. Rev.* – 2008. – Vol. 108. – P. 2064-2110.
89. L. Landau, E. Lifshitz. On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies // *Phys. Zeitsch. der Sow.* – 1935. – Vol. 8. – P. 153-169.

90. T. L. Gilbert. A phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials // IEEE Trans. Magn. – 2004. – Vol. 40. – P. 3443-3449.
91. E. Martinez, L. Lopez-Diaz, L. Torres. Nonphenomenological damping constant due to eddy current losses in uniformly magnetized samples // Journal of Applied Physics. – 2006. – Vol. 99. – P. 123912(9).
92. V. V. Batygin, I. N. Toptygin, Problems in Electrodynamics, 2nd ed. (Academic Press, London, 1978) (Problems 5.51 and 5.53).
93. S. I. Denisov, T. V. Lyuty, B. O. Pedchenko, H. V. Babych. Eddy current effects in the magnetization dynamics of ferromagnetic metal nanoparticles // J. Appl. Phys. – 2014. – Vol. 116. – P. 043911(6).
94. S. I. Denisov, T. V. Lyuty, H. V. Babych, B. O. Pedchenko. Contribution of the magnetic field of eddy currents to the Gilbert damping parameter // J. Nano- Electron. Phys. – 2014. – Vol. 6, No2. – P. 02011(5pp).
95. C. H. Back, D. Weller, J. Heidmann, D. Mauri, D. Guarisco, E. L. Garwin, H. C. Siegmann. Magnetization reversal in ultrashort magnetic field pulses // Phys. Rev Lett. – 1998. – Vol. 81. – P. 3251-3254.
96. M. Bauer, J. Fassbender, B. Hillebrands, R. L. Stamps. Switching behavior of a Stoner particle beyond the relaxation time limit // Phys. Rev. B. – 2000. – Vol. 61. – P. 3410-3416.
97. S. Kaka, S. E. Russek. Precessional switching of submicrometer spin valves // Appl. Phys. Lett. – 2002. – Vol. 80. – P. 2958-2960.
98. J. L. Dormann, D. Fiorani, E. Tronc. Magnetic relaxation in finite-particle systems // Adv. Chem. Phys. – 2007. – Vol. 98. – P. 283-494.
99. Brown W. F., Jr. Thermal fluctuations of a single-domain particle // Phys. Rev. – 1963. – Vol. 130. – P. 1677-1686.
100. Risken H. The Fokker-Planck equation: Methods of solution and applications – Berlin: Springer-Verlag, 1989. – 472 p.
101. S. I. Denisov, T. V. Lyuty, P. Hänggi. Magnetization of nanoparticle systems in a rotating magnetic field // Phys. Rev. Lett. – 2006. – Vol. 97. – P. 227202(4).
102. S. I. Denisov, A. Yu. Polyakov, T. V. Lyuty. Resonant suppression of thermal stability of the nanoparticle magnetization by a rotating magnetic field // Phys. Rev. B. – 2011. – Vol. 84. – P. 174410(11).

103. G. Samorodnitsky, M. S. Taqqu. Stable non-Gaussian processes: Stochastic models with infinite variance (New York, Chapman and Hall, 1994, 632 p.)
104. K. Ito. Stochastic differential equations in a differentiable manifold // Nagoya Math. J. – 1950. – Vol. 1. – P. 35-47.
105. S. I. Denisov, W. Horsthemke, P. Hänggi. Generalized Fokker-Planck equation: Derivation and exact solutions // Eur. Phys. J. B. – 2009. – Vol. 68. – P. 567-575.
106. R. Rosensweig. Ferrohydrodynamics (Cambridge University Press, 1985).
107. B. J. Kim, Yu. Piao, N. Lee, Y. Il Park, In-H. Lee J.-Ho Lee, S. R. Paik, T. Hyeon. Magnetic nanocomposite spheres decorated with NiO nanoparticles for a magnetically recyclable protein separation system // Adv. Mater. – 2010. – Vol. 22. – P. 57-60.
108. A. Jordan, R. Scholz, P. Wust, H. Fähling, R. Felix. Magnetic Fluid hyperthermia (MFH): Cancer treatment with AC magnetic field induced excitation of biocompatible superparamagnetic nanoparticles // J. Magn. Magn. Mat. – 1999. – Vol.201. – P.413-419.
109. Ch. Kittel. Introduction to Solid State Physics, 8th ed. (Wiley, 2005).
110. K.I. Morozov, A.V. Lebedev. The effect of magneto-dipole interactions on the magnetization curves of ferrofluid // J. Magn. Magn. Mat. – 1990. – Vol. 85. – P. 51-53.
111. Y. A. Buyevich, A. O. Ivanov. Equilibrium properties of ferrocolloids // Physica A. – 1992. – Vol. 190. – P. 276-294.
112. A. O. Ivanov, O. B. Kuznetsova. Magnetic properties of dense ferrofluids // J. Magn. Magn. Mat. – 2002. – Vol. 252. – P. 135-137.
113. H. Gould, J. Tobochnik. Computer Simulation Methods. Applications to Physical Systems (Addison-Wesley Publishing, 1988).
114. R. W. Chantrell, A. Bradbury, J. Popplewell, S. W. Charles. Particle cluster configuration in magnetic fluids // J. Phys. D.: Appl. Phys. – 1980. – Vol. 13. – P. L119-L122.
115. K. O'Grady, A. Bradbury, S. W. Charles, S. Menear, J. Popplewell, R. W. Chantrell. Curie-Weiss behavior in ferrofluids // J. Magn. Magn.

- Mat. – 1983. – Vol. 31-34. – P. 958-960.
116. N. L. Tran, H. H. Tran. Role of the poly-dispersity and the dipolar interaction in magnetic nanoparticle systems: Monte Carlo study // J. Non-Cryst. Solid. – 2011. – Vol.357. – P. 996-999.
117. S. W. Davis, W. McCausland, H. C. McGahagan, C. T. Tanaka, M. Widom. Cluster-based Monte Carlo simulation of ferrofluids // Phys. Rev. E. – 1999. – Vol. 59. – P. 2424-2427.
118. G. Meriguet, M. Jardat, P. Turq. Structural properties of charge-stabilized ferrofluids under a magnetic field: A Brownian dynamics study // J. Chem. Phys. – 2004. – Vol. 121. – P. 6078-6083.
119. Z. Wang, C. Holm, H. W. Muller. Molecular dynamics study on the equilibrium magnetization properties and structure of ferrofluids // Phys. Rev. E. – 2002. – Vol. 66. – P. 021405(13).
120. M. I. Shliomis. Magnetic fluids // Sov. Phys. Usp. – 1974. – Vol. 17. – P. 153-169.
121. Yu. L. Klimontovich. Fluctuation-dissipation relations. Role of the finiteness of the correlation time. Quantum generalization of Nyquist's formula // Sov. Phys. Usp. – 1987. – Vol.30. – P.154-167.
122. <http://www.nvidia.ru/object/tesla-server-gpus-ru.html>.
123. J. Sanders, E. Kandrot. CUDA by Examples (Addison-Wesley, 2011).
124. <http://top500.org/list/2012/06/100/>.
125. H. Nguyen. GPU Gems, Vol. 3, first ed. (Addison-Wesley Professional, 2007).
126. J. Barnes, P. Hut. A hierarchical $O(N \log N)$ force-calculation algorithm // Nature. – 1986. – Vol. 324. – P. 446-449.
127. M. Burtscher, K. Pingali. An efficient CUDA implementation of the treebased Barnes-Hut N-body algorithm – GPU Gems'11, GPU Computing Gems Emerald Edition, 2011.
128. L. Greengard, V. Rokhlin, A Fast Algorithm for Particle Simulations // J. Comp. Phys. – 1987. – Vol. 73. – P. 325-348.
129. CUDA fortran programming guide and reference. URL: <http://www.pgroup.com/lit/whitepapers/pgicudaforug.pdf>, 2012.
130. A. Yu. Polyakov, T. V. Lyutyy, S. Denisov, V. V. Reva, P. Hänggi. Large-

scale ferrofluid simulations on graphics processing units // *Comp. Phys. Comm.* – 2013. – Vol. 184. – P. 1483-1489.

131. T. V. Lyutyy, A. Yu. Polyakov, V. V. Reva. Simulation of Ferrofluids in Confined Domains. // *J. Nano- Electron. Phys.* – 2012. – Vol. 4. – P. 04027(9).