МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ «ЛЬВІВСЬКА ПОЛІТЕХНІКА»

Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису

ВІЗНОВИЧ ОЛЕКСАНДРА ВАСИЛІВНА

УДК 510;519.6;530.1;538.9

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДИФУЗІЙНИХ ПРОЦЕСІВ В РАМКАХ СТАТИСТИКИ РЕНІ

01.05.02 — математичне моделювання та обчислювальні методи

05 «Технічні науки»
(галузь знань)

Подається на здобуття наукового ступеня
кандидата технічних наук

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело

(підпис, ініціали та прізвище здобувача)

Науковий керівник —
доктор фіз.-мат. наук, професор
Костробій П. П.

Ідентичність всіх примірників дисертації
ЗАСВІДЧУЮ:
Вчений секретар спеціалізованої вченої ради
/**Р. А. Бунь**/

Львів – 2018

Анотація

Візнович О.В. Математичне моделювання дифузійних процесів в рамках статистики Рені. — Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата техічних наук за спеціальністю 01.05.02 — "Математичне моделювання та обчислювальні методи". — Національний університет "Львівська політехніка Львів, 2018.

Зміст дисертації. Дисертація присвячена побудові та дослідженням математичних моделей дифузійних та субдифузійних процесів частинок у просторово–неоднорідних системах на основі узагальнених рівнянь дифузії, отриманих методом нерівноважного статистичного оператора (НСО) Зубарєва у рамках статистики на основі ентропії Рені. Виведено узагальнені рівняння q-дифузії та електродифузії (для носіїв заряду) у дробових похідних на основі рівняння Ліувілля у дробових похідних, запропонованого Тарасовим у методі НСО. Проведено чисельне моделювання субдифузійного імпедансу на основі рівняння Кеттано у дробових похідних, що дало можливість проаналізувати нелінійну природу явищ переносу заряду в мультишарових наноструктурах на основі частотної залежності дійсної та уявної частин її узагальненого опору. Отримано якісне погодження із експериментальними дослідженнями для мультишарових наноструктур. Для математичного моделювання дифузійних процеів отримано рівняння q-дифузії для однокомпонентної системи взаємодіючих частинок в методі НСО та проведено числовий розрахунок просторово-часової залежності функції розсіювання та коефіцієнта q-дифузії при відповідних значеннях параметра Рені q для модельної системи із застосуванням кумулянтних розкладів. Запропоновано математичну модель опису кінетичних та гідродинамічних процесів для системи взаємодіючих частинок, що перебувають у нерівноважних станах, далеких від рівноваги на основі узагальнених кінетичних рівняннях для нерівноважних одночастинкової та двочастинкової функцій розподілу, отриманих методом НСО Зубарєва для класичних систем далеких від рівноваги у статистиці Рені. Показано, що у структуру рівнянь входять узагальнені коефіцієнти дифузії і тертя частинок у просторі координат та імпульсів.

У **вступі** зазначено актуальність проблем, обгрунтовано мету та основ-

ні завдання досліджень. Описано зв'язок роботи з науковими програмами та темами. Сформульовано наукову новизну і практичну цінність отриманих результатів. Зазначено дані про особистий внесок автора, апробацію результатів роботи та публікації.

У **першому розділі *"Огляд літератури"*** особлива увага приділяється математичним моделям процесів аномальної дифузії у конденсованих системах зі степеневими розподілами відповідних статистик Тсалліса та Рені, а також рівнянням дифузії Фоккера-Планка у дробових похідних. Представлено огляд робіт щодо математичного моделювання субдифузійного імпедансу для електролітичних систем. Подано аналіз робіт щодо побудови рівнянь дифузії, кінетичних рівнянь у дробових похідних та короткий виклад рівняння Ліувілля у дробових похідних за роботами Тарасова [8, 27]. Відображено результати опрацювання основних робіт щодо проблем необхідності побудови математичної моделі узгодженого опису кінетичних та гідродинамічних процесів у густих газах та рідинах далеких від рівноваги, коли багаточастинковими кореляціями, пов'язаними з локальними законами збереження не можна нехтувати. Наприкінці розділу наведено стислий виклад методу НСО Зубарєва у статистиці на основі ентропії Рені, за допомогою якого проводилися дослідження у роботі.

У **другому розділі *"Узагальнені рівняння типу дифузії у дробових похідних"*** розроблено математичні моделі дифузії з використанням рівнянь у дробових похідних, виходячи з рівняння Ліувілля у дробових похідних для просторово-неоднорідної системи. Методом НСО знайдено загальний розв'язок рівняння Ліувілля у дробових похідних, за допомогою якого виводиться узагальнене рівняння дифузії у дробових похідних. Для математичного моделювання субдифузійних процесів у мультишарових структурах, що характеризуються фрактальною структурою, виведено також узагальнені рівняння електродифузії для носіїв заряду у дробових похідних, на основі методу НСО Зубарєва і ентропії Рені. Отримано ряд рівнянь типу дифузії для відповідних значень параметрів фрактальності у просторі та часі.

У **третьому розділі *"Математичне моделювання субдифузійних процесів в електролітичній системі"*** подано результати математичного моделювання субдифузійних процесів в електролітичній системі для пояснення діаграм Найквіста експериментальних досліджень [5] для системи $GaSe$ з інкапсульованим β-циклодекстрином. Експериментальні дослідження імпедансних характеристик даних систем показали, що процеси переносу носіїв заряду мають нелінійний стадійний характер із складною поведінкою релаксаційних процесів у часі. Для моделювання таких релаксаційних процесів застосовано рівняння дифузії типу Кеттано.

У **четвертому розділі** ***"Математичне моделювання коефіцієнтів q-дифузії"*** розглянуто один із шляхів отримання узагальненого (немарковського) рівняння дифузії з використанням методу НСО Зубарєва та принципу максимуму ентропії Рені, який базується на степеневих розподілах. Такі підходи важливі з точки зору математичного моделювання дифузійних процесів у випадкових та регулярних структурах. Обґрунтовано один із шляхів розрахунків коефіцієнтів q-дифузії, які відображають механізми процесів переносу. Проведено чисельний розрахунок функції розсіювання для модельної системи частинок, що зв'язана з динамічним структурним фактором, який може вимірюватися експериментально у процесах розсіювання нейтронів.

У **п'ятому розділі** ***"Математична модель кінетичних процесів в статистиці на основі ентропії Рені"*** подано модель опису кінетичних та гідродинамічних процесів для системи, що перебуває у нерівноважних станах, далеких від рівноваги. Виходячи із принципу максимуму ентропії Рені отримано релевантну функцію розподілу і на основі неї нерівноважну функцію розподілу частинок, як розв'язок рівняння Ліувілля. За допомогою нерівноважної функції розподілу отримано узагальнені кінетичні рівняння для нерівноважних одно- та двочастинкових функцій розподілу. Розкрито внутрішню структуру узагальнених функцій пам'яті і встановлено їх зв'язок із узагальненими коефіцієнтами дифузії та тертя у просторі координат та імпульсів, що характерно для систем далеких від рівноваги.

Ключові слова: математична модель, дифузійний процес, статистика Рені, коефіцієнт q-дифузії, рівняння Ліувілля, нерівноважний статистичний оператор, рівняння Кеттано, мультишарова наноструктура.

ПЕРЕЛІК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Розділ монографії

1. Костробій П. П. Субдифузійний імпеданс у мультишарових наноструктурах: експеримент, моделювання, теорія / Костробій П. П., Токарчук М. В., Григорчак І. І., Іващишин Ф. О., Маркович Б. М., Візнович О. В. // Фізичні процеси та їх мікроскопічні моделі в періодичних неорганічно/органічних клатратах : Монографія / Григорчак І. І., Костробій П. П., Стасюк І. В., Токарчук М. В., Величко О. В., Іващишин Ф. О., Маркович Б. М. – Львів : Вид. Растр-7, 2015. – С. 276–285.

Статті у наукових періодичних виданнях інших держав

1. Kostrobij P. Generalized kinetic equations for dense gases and liquids in the Zubarev nonequilibrium statistical operator method and Renyi statistics / Kostrobij P., Viznovych O., Markiv B., Tokarchuk M. // Theoret. Math. Phys. – 2015. – Vol. 184, No. 1. – P. 1020–1032.

2. Kostrobij P. Generalized diffusion equation with fractional derivatives within Renyi statistics / P. Kostrobij, B. Markovych, O. Viznovych, M. Tokarchuk // J. Math. Phys. – 2016. – Vol. 57. – P. 093301.

3. Grygorchak I. I. Modification of properties of GaSe β–cyclodexterin $FeSO_4$ clathrat by synthesis in superposed electric and light-wave fields / Grygorchak I. I., Ivashchyshyn F. O., Tokarchuk M. V., Pokladok N. T., Viznovych O. V. // J. Appl. Phys. – 2017. – Vol. 121. – P. 185501(1–6).

Статті у наукових фахових виданнях України

1. Костробій П. П. Узагальнене рівняння дифузії в статистиці Рені / Костробій П. П., Маркович Б. М., Візнович О. В., Токарчук М. В. // Фіз.-матем. модел. інформ. техн. – 2015. – Вип. 21, № 2. – С. 117–124.

2. Kostrobij P. P. Mathematical modeling of subdiffusion impedance in multilayer nanostructures / Kostrobij P. P., Grygorchak I. I., Ivaschyshyn F. O.,

Markovych B. M., Viznovych O. V., Tokarchuk M. V. // Math. Model. Comp. – 2015. – Vol. 2, No 2. – P. 154-159.

3. Костробій П. Узагальнене рівняння дифузії у дробових похідних у статистиці Рені / Костробій П., Маркович Б., Візнович О., Токарчук М. // Фіз.-матем. модел. інформ. техн. – 2016. – Вип. 23. – С. 108–118.

4. Kostrobij P. Generalized electrodiffusion equation with fractality of space-time / P. Kostrobij, B. Markovych, O. Viznovych, M. Tokarchuk // Math. Model. Comp. – 2016. – Vol. 3, No 2. – P. 163–172.

Стаття у наукових виданнях України

1. Kostrobij P. P. Generalized kinetic equations for dense gases and liquids far from equilibrium in Renyi statistics / Kostrobij P. P., Viznovych O. V., Markiv B. B., Tokarchuk M. V. // Актуальні проблеми математичної фізики та її застосувань. Збірник праць Інституту математики НАН України. – 2014. – Том 11, № 1. – С. 108–122.

2. Костробій П. П., Маркович Б. М., Візнович О. В., Токарчук М. В. / Узагальнені рівняння електродифузії з просторово-часовою фрактальністю. – Львів, 2017. – 21 с. (Препринт ICMP–17–03U).

Матеріали конференцій

1. Візнович О. Узагальнені кінетичні рівняння для густих газів та рідин у статистиці Рені / Візнович О., Костробій П., Марків Б., Токарчук М. // Proc. VI Intern. Conf. "Physics of Disordered Systems October 14–16, 2013. – Lviv, 2013. – P. 15.

2. Костробій П. П. Математичне моделювання субдифузійного імпедансу в електролітичних системах / Костробій П. П., Григорчак І. І., Іващишин Ф. О., Маркович Б. М., Візнович О. В., Токарчук М. В. // Науково-технічна конференція "Мікро– та нанонеоднорідні матеріали: моделі та експеримент"(INTERPOR'15). Збірник матеріалів, Львів, 22–24 вересня 2015. – Львів, 2015. – С. 54–56.

3. Костробій П. П. Узагальнене рівняння дифузії в статистиці Рені / Костробій П. П., Маркович Б. М., Візнович О. В., Токарчук М. В. // Науково–технічна конференція "Мікро– та нанонеоднорідні матеріали: моделі та експеримент"(INTERPOR'15). Збірник матеріалів. – Львів, 22-24 вересня 2015. – Львів, 2015. – С. 57–59.

4. Візнович О. В. Математичне моделювання аномальної дифузії / Візнович О. В. // Міжнародна міждисциплінарна наукова конференція студентів, аспірантів і молодих вчених "Science and Scientists": Збірник матеріалів, 21–22 грудня 2015. – Дніпропетровськ : Об'єднання науковців GlobalNauka, 2015. – С. 80–83.

5. Візнович О.В. Математичне моделювання субдифузійного імпедансу у мультишарових наноструктурах / Візнович О.В. // Inżynieria i Technologia. Osiągniecia naukowe, rozwój, propozycja na rok 2015: Zbiór artykułow naukowych, – Warszawa, 30.12.2015–03.01.2016. – Warszawa, 2016. – С. 120–122.

6. Костробій П. П. До проблем математичного моделювання субдифузійного імпедансу в електролітичних системах / П. П. Костробій, Б. М. Маркович, М. В. Токарчук, О. В. Візнович // Інформатика та системні науки (ІСН–2016): матеріали VII Всеукраїнської науково–практичної конференції за міжнародною участю, м. Полтава, 10–12 березня 2016 р. – Полтава: ПУЕТ, 2016. – С. 163.

7. Костробій П. П. Узагальнене рівняння дифузії у дробових похідних в статистиці Рені / Костробій П. П., Візнович О. В. // 16–та Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених із статистичної фізики та теорії конденсованої речовини / Інститут фізики конденсованих систем НАН України, м. Львів, 9–10 червня 2016р. – Львів, 2016. – С. 32.

8. Kostrobij P. P. / Generalized diffusion equation in the fractional derivatives in Renyi statistics / P. P. Kostrobij, B. M. Markovych, M. V. Tokarchuk, O. V. Viznovych // Bogolyubov Conference on Problems of Theoretical Physics dedicated to the 50th anniversary of the Bogolyubov Institute for

Theoretical Physics of the NAS of Ukraine, Kyiv, May 24 – 26, 2016. – Kyiv, 2016. – P. 53.

9. Кostробій П. Узагальнені рівняння електродифузії з просторово–часовою фрактальністю / Костробій П., Маркович Б., Візнович О., Токарчук М. // Прикладні задачі та IT-технології:. Матеріали міжвузівського наукового семінару, присвяченого 100–річчю від дня народження професора Василя Павловича Рубаника (1917–1993) і 55–річчю кафедри прикладної математики та інформаційних технологій, Чернівці, 9–10 червня 2017. – Чернівці: Яворський С. Н., 2017. – С. 58–59.

10. Kostrobij P. P. Generalized diffusion equation with fractional derivatives within Renyi statistics / P. P. Kostrobij, B. M. Markovych, O. V. Viznovych, M. V. Tokarchuk // XIV Міжнародна конференція "Функціональні та наноструктуровані матеріали"(FNMA'2017) і VII Міжнародна конференція "Фізика невпорядкованих систем"(PDS'2017), Львів, 25–29 вересня 2017р. – Львів, 2017. – С. 86.

ABSTRACT

Viznovych O.V. Mathematical modeling of diffusion processes within Renyi statistics. — On the rights of manuscript. Thesis for PhD degree on technical sciences in specialty 01.05.02 mathematical modeling and computational methods, Lviv Polytechnic National University, Lviv, 2018.

The generalized equation (non-Markovian) of the diffusion in fractional derivatives was obtained using the NSO method. With $q = 1$ the generalized equation of q-diffusion in the Renyi statistics goes into a generalized equation of the diffusion of Gibbs statistics in fractional derivatives. The generalized equations of q-diffusion and electrodifusion (for ions) in fractional derivatives have been established on the basis of the Liouville equation in fractional derivatives in the non-equilibrium statistical operator method. For the first time, generalized Kettano-type electrodiffusion equations for systems with spatial-temporal fractality have been obtained.

A numerical modelling of the sub-diffusion impedance on the basis of Kettano equation in fractional derivatives has been carried out, enabling to analyse the nonlinear nature of charge transfer phenomena in multi-layer nanostructures based

on the frequency dependence of the real and imaginary parts of its generalized resistance. A qualitative coordination with the experimental studies for multi-layer nanostructures has been obtained. The analysis of the outlined Nyquist diagrams has led to a somewhat unexpected result: the increase of the frequency dispersion of the impedance hodograph, observed in the experiment, in the synthesis in an electric field with simultaneous illumination is not due to the growth of τ, as it was expected, but due to the change in the temporal fractal dimension α. This also applies to the appearance of inductive response in the high-frequency area. The increase in the frequency dispersion $Z(i\omega)$ under illumination, which involves photoinduced polarization in such systems, also correlates primarily with the change of α.

For mathematical modelling of diffusion processes, the q-diffusion equation for a one-component system of interacting particles in the non-equilibrium statistical operator method has been obtained and a numerical calculation of the spatial-temporal dependence of the scattering function and the q-diffusion coefficient with the corresponding values of the Reni q parameter for the model system with applying cumulative decompositions has been carried out. With $q = 1$ the results are obtained that correspond to the processes of normal diffusion. It is important to note that in the temporal dependence of the correlation functions, a negative area of dependence has been observed which is actively researched by other methods, in particular by the Mori projection operators' method in the Gibbs statistics.

A mathematical model for describing kinetic processes for a system of interacting particles in non-equilibrium states distant from equilibrium based on generalized kinetic equations for non-equilibrium single-particle and two-particle distribution functions obtained by Zubarev's method of a non-equilibrium statistical operator for classical systems distant from equilibrium in the Reni statistics has been proposed. It has been shown that the structure of the equations includes generalized coefficients of diffusion and friction of particles in the space of coordinates and impulses. The internal structure of the generalized memory functions has been revealed, which made it possible to show that the kinetic equations are of Fokker-Planck type, which contain the correlation functions of the second and higher orders according to the dynamic variables: the microscopic densities of the number of particles, their impulse and power in the space of coordinates and impulses. The fourth-order memory functions according to variables allow for approximations corresponding to the ideology of the theory of interacting modes and can be used to model nonlinear processes.

Key words: mathematical model, diffusion process, Renyi statistics, q-diffusion coefficient, the Liouville equation, non-equilibrium statistical operator, Kettano equation, multi-layer nanostructure.

LIST OF PUBLICATIONS BY THE SUBJECT OF DISSERTATION

Monograph section

1. Kostrobij P. P. Subdiffusion impedance in multilayer nanostructures: experiment, modeling, theory / Kostrobij P. P., Tokarchuk M. V., Grygorchak I. I., Ivashchyshyn F. O., Markovych B. M., Viznovych O. V. // Physical processes and their microscopic models in periodic inorganic/organic clathrates: Monograph / Grygorchak I. I., Kostrobij P. P., Stasyuk I. V., Tokarchuk M. V., Velychko O. V., Ivaschyshyn F. O., Markovych B. M. – Lviv: Edit. Raster–7, – 2015. – P. 276–285. – (In Ukrainian).

Articles in scientific periodicals of other states

1. Kostrobij P. Generalized kinetic equations for dense gases and liquids in the Zubarev nonequilibrium statistical operator method and Renyi statistics / Kostrobij P., Viznovych O., Markiv B., Tokarchuk M. // Theoret. Math. Phys. – 2015. – Vol. 184, No. 1. – P. 1020–1032. – (In English).

2. Kostrobij P. Generalized diffusion equation with fractional derivatives within Renyi statistics / P. Kostrobij, B. Markovych, O. Viznovych, M. Tokarchuk // J. Math. Phys. – 2016. – Vol. 57, – P. 093301. – (In English).

3. Grygorchak I. I. Modification of properties of GaSe β–cyclodexterin $FeSO_4$ Clathrat by synthesis in superposed electric and light-wave fields / Grygorchak I. I., Ivashchyshyn F. O., Tokarchuk M. V., Pokladok N. T., Viznovych O. V. // J. Appl. Phys. – 2017. – Vol. 121.– P. 185501(1–6). – (In English).

Articles in scientific professional editions of Ukraine

1. Kostrobij P. P. Generalized diffusion equation in Renyi statistics / Kostrobij P. P., Markovych B. M., Viznovych O. V., Tokarchuk M. V. // Physico-mathematical modelling and informational technologies. – 2015. – Vol. 21, № 2. – P. 117–124. – (In Ukrainian).

2. Kostrobij P. P. Mathematical modeling of subdiffusion impedance in multilayer nanostructures / Kostrobij P. P., Grygorchak I. I., Ivaschyshyn F. O., Markovych B. M., Viznovych O. V., Tokarchuk M. V. // Math. Model. Comp. – 2015.– Vol. 2, No 2. – P. 154–159. – (In English).

3. Kostrobij P. Generalized diffusion equation with fractional derivatives within Renyi statistics / Kostrobij P., Markovych B., Viznovych O., Tokarchuk M. // Physico-mathematical modelling and informational technologies. – 2016. – Vol. 23. – P. 108–118. – (In Ukrainian).

4. Kostrobij P. Generalized electrodiffusion equation with fractality of space-time / P. Kostrobij, B. Markovych, O. Viznovych, and M. Tokarchuk // Math. Model. Comp. – 2016. - Vol. 3, No 2. – P. 163–172. – (In English).

Articles in scientific editions of Ukraine

1. Kostrobij P. P. Generalized kinetic equations for dense gases and liquids far from equilibrium in Renyi statistics / Kostrobij P. P., Viznovych O. V., Markiv B. B., Tokarchuk M. V. // Actual problems of mathematical physics and its applications. – 2014. – Vol. 11, № 1. – P. 108–122. – (In English).

2. Kostrobij P. P., Markovych B. M., Viznovych O. V., Tokarchuk M. V. / Generalized equations of electrodifusion with space-time fractality. – Lviv, 2017. – 21 p. (Preprint ICMP-17-03U). – (In Ukrainian).

Materials of conferences

1. Kostrobij P. Generalized kinetic equations for dense gases and liquids in Renyi statistics / Viznovych O., Kostrobij P., Markiv B., Tokarchuk M. // Proc. VI Internat. Conf. "Physics of Disordered Systems October 14–16, 2013. – Lviv, 2013. – P. 15. – (In Ukrainian).

2. Kostrobij P. P. Mathematical modeling of subdiffusion impedance in electolytic systems / Kostrobij P. P., Grygorchak I. I., Ivashchyshyn F. O., Markovych B. M., Viznovych O. V., Tokarchuk M. V. // Scientific and technical conference "Micro– and nanoneodnoridni materials: model and experiment"(INTERPOR'15). Collection of materials, Lviv, 22–24 september 2015. – Lviv, 2015. – P. 54–56. – (In Ukrainian).

3. Kostrobij P. P. Generalized diffusion equation in Renyi statistics / Kostrobij P P., Markovych B. M., Viznovych O. V., Tokarchuk M. V. //Scientific and technical conference "Micro– and nanoneodnoridni materials: model and experiment"(INTERPOR'15). Collection of materials. – Lviv, 22–24 september 2015. – Lviv, 2015. – P. 57–59. – (In Ukrainian).

4. Viznovych O. V. Mathematical modeling of abnormal diffusion / Viznovych O. V. // International scientific conference for students, postgraduates and young scientists "Science and Scientists": C. Materials, 21-22 december 2015p. – Dnepropetrovsk: Association of scientists GlobalNauka, 2015. – P. 80–83. – (In Ukrainian).

5. Viznovych O. V. Mathematical modeling of subdiffusion impedance in multilayer structures / Viznovych O. V. // Inżynieria i Technologia. Osiągniecia naukowe, rozwój, propozycje na rok 2015: Zbiór artykułow naukowych, Warszawa, 30.12.2015–03.01.2016. – Warszawa, 2016. – P. 120–122. – (In Ukrainian).

6. Kostrobij P. P. To problems of mathematical modeling of subdiffusion impedance in electrolytic systems / P. P. Kostrobij, B. M. Markovych, M. V. Tokarchuk, O. V. Viznovych // Informatics and system science (ICH–2016): materials VII All–Ukrainian scientific and practical conference with international participation, Poltava, 10–12 march 2016p. – Poltava: PUET, 2016. – P. 163. – (In Ukrainian).

7. Kostrobij P. P. Generalized diffusion equation for fractional derivatives in Renyi statistics / Kostrobij P. P., Viznovych O. V. / XVII All–Ukrainian school–seminar and competition of young scientists on statistical physics and

condensed matter theory // Institute of condensed matter physics, NAS of Ukraine, Lviv, 9–10 june 2016 p. – C. 32. – (In Ukrainian).

8. Kostrobij P. P. Generalized diffusion equation in the fractional derivatives in Renyi Statistics / P. P. Kostrobij, B M. Markovych, M. V. Tokarchuk, O. V. Viznovych // Bogolyubov Conference Problems of Theoretical Physics dedicated to the 50th anniversary of the Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of the NAS of Ukraine, Kyiv, May 24–26, 2016. – Kyiv, 2016. – P. 53. – (In English).

9. Kostrobij P. Generalized electrodiffusion equation with fractality of space-time / Kostrobij P., Markovych B., Viznovych O., Tokarchuk M. // Applied tasks and IT technology:. Materials of the interuniversity scientific seminar, dedicated to 100th anniversary of birth professor V. P. Rubanika (1917–1993) and the 55th anniversary of the Department of Applied Mathematics and information technology, 9–10 june 2017. – Chernivtsi: Jaworski C. N., 2017. – P. 58–59. – (In Ukrainian).

10. Kostrobij P. P. Generalized diffusion equation with fractional derivatives within renyi statistics / P. P. Kostrobij, B. M. Markovych, O. V. Viznovych, M. V. Tokarchuk // The 14th International Conference "Functional and Nanostructured Materials"(FNMA'2017) and The 7th International Conference "Physics of Disordered Systems"(PDS'2017), Lviv, 25–29 september 2017 p. – Lviv, 2017. – P. 86. – (In English).

Зміст

ВСТУП

Актуальність теми. Сучасний етап розвитку технології на основі гетероструктурованих неорганічно/неорганічних, неорганічно/органічних нанокомпозитних матеріалів [1, 2], з якими пов'язують можливість реалізації унікальних фізико-хімічних властивостей, стимулює теоретичні дослідження та математичне моделювання реакційно-електродифузійних процесів у таких системах.

Важливою прикладною задачею є опис напівпровідникових систем зі стадійним упорядкуванням, що виникає у шаруватих структурах при застосуванні методики попередньої інтеркаляції–деінтеркаляції для покращення входження гостьових частинок. У зв'язку із експериментальною складністю створення таких структур для прогнозування необхідних властивостей велике значення має побудова та дослідження математичних моделей дифузійного імпедансу для ієрархічних структур. У таких ієрархічних структурах спостерігаються процеси аномальної (супер–, суб–) дифузії частинок [3–7], механізми яких далеко не вивчені. Дійсно, у сучасних дослідженнях процеси переносу, зокрема дифузія частинок у пористих середовищах, неупорядкованих структурах описується співвідношенням для їх середньоквадратичного зміщення:

$$\langle(\vec{r}(t)-\vec{r}(0))^2\rangle = 2D_\alpha t^\alpha \frac{1}{\Gamma(1+\alpha)},$$

де D_α — коефіцієнт "аномальної"дифузії, t — час, $\Gamma(1+\alpha)$ — гамма–функція, параметр α , що змінюється в інтервалі $0 < \alpha \leq 1$. При $\alpha = 1$ це співвідношення переходить у відоме співвідношення Ейнштейна

$$\left\langle(\vec{r}(t)-\vec{r}(0))^2\right\rangle = 2Dt,$$

де D — коефіцієнт дифузії, який входить у рівняння дифузії Фіка. Отже, ми маємо нефіковські процеси і виникає питання, які математичні моделі можуть описувати їх.

При досліджені електрохімічного імпедансу у просторово–неоднорідних системах процеси проходження струму описуються наступним співвідношенням частотної залежності узагальненого опору:

$$Z(i\omega) \propto (i\omega)^{-\dfrac{\beta}{2}},$$

де параметр β змінюється в інтервалі $0 < \beta \leq 2$. При $\beta = 2$ це співвідношення переходить у електрохімічний імпеданс Варбурга

$$Z(i\omega) \propto (i\omega)^{-1},$$

якому відповідають фіковські процеси дифузії носіїв заряду. Це означає, що існують "аномальні"електрохімічні процеси переносу заряду у просторово–неоднорідних системах. З цієї точки зору побудова математичної моделі дифузійних процесів, що супроводжуються аномальною поведінкою, зокрема для атомів та іонів у ієрархічних структурах є актуальною проблемою і має як теоретичне, так і прикладне значення. Розрахунок просторово–часової залежності неоднорідних коефіцієнтів дифузії у таких процесах є першочерговою проблемою, оскільки вони відповідають за основні механізми.

Для математичного моделювання процесів переносу у різних системах, зокрема з фрактальною структурою актуальними залишаються проблеми послідовного виведення рівнянь переносу (дифузії, гідродинаміки, кінетичних рівнянь) у дробових похідних [8]. Якщо математичне моделювання дифузійних процесів у конденсованих системах у рамках статистики на основі ентропії Гіббса на даний час добре розроблені [9–16], то опис суб–, супердифузійних процесів у різних середовищах виходить за рамки статистики Гіббса і розглядається в узагальнених статистиках на основі ентропій Тсалліса, Рені та ін. [19–23]. З цієї точки зору важливою є розробка математичних методів моделювання дифузійних процесів у статистиці Рені, для якої характерні степеневі закони для розподілів у часі. При дослідженні складних самоорганізаційних, фрактальних структур та процесів субдифузії у них необхідні нові математичні моделі та рівняння переносу [24]. Вивчення та математичне моделювання нелінійних процесів у пористих середовищах залишаються актуальними у теоретичній і математичній фізиці як на кінетичному, так і на гідродинамічному рівні опису.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Основу дисертаційної роботи складають результати теоретичних та практичних досліджень, виконаних автором у межах планових робіт кафедри прикладної математики Інституту прикладної математики та фундаментальних наук Національного університету "Львівська політехніка"щодо дослідження математичних моделей конкретних типів систем, а також науково-дослідних робіт, що виконувалися кафедрою, а саме: "Моделі квантово-статистичного опису каталітичних процесів на металевих підкладах"(номер державної реєстрації 01107U001091) 2012–2013р.; "Фізичні процеси і їх математичне моделювання у наногібридизованих структурах пристроїв сенсорики і накопичення енергії"(номер державної реєстрації 0113U003189) 2013–2015р.; "Побудова і дослідження методів розв'язування задач прикладної математики та інформатики"(номер державної реєстрації 0113U005296) 2013–2017р.

Мета і завдання дослідження. Метою роботи є побудова та дослідження математичних моделей дифузійних та субдифузійних процесів частинок у просторово-неоднорідних системах на основі узагальнених рівнянь дифузії отриманих методом нерівноважного статистичного оператора (НСО) Зубарєва [25] у рамках статистики на основі ентропії Рені [26].

У роботі для досягнення вказаної мети були передбачені такі *завдання*:

- для математичного моделювання дифузійних, супер- та субдифузійних процесів отримати неоднорідні рівняння дифузії частинок, використавши метод НСО Зубарєва у рамках статистики на основі ентропії Рені;
- на основі математичного апарату дробового числення отримати узагальнене рівняння дифузії на основі рівняння Ліувілля у дробових похідних;
- побудова нових математичних моделей розрахунку субдифузійного імпедансу у мультишарових наноструктурах та алгоритмів їх числового дослідження;
- побудова моделей та розрахунок просторово-часової залежності неодно-

рідних коефіцієнтів дифузії в рамках статистики на основі ентропії Рені для частинок у просторово неоднорідних системах;

- для побудови математичної моделі опису кінетичних процесів отримати узагальнені кінетичні рівняння для нерівноважних одно- і двочастинкових функцій розподілу для систем взаємодіючих частинок для станів далеких від рівноваги у статистиці на основі ентропії Рені.

Об'єктом дослідження є процеси дифузії та аномальної дифузії у просторово-неоднорідних системах, субдифузійний імпеданс у мультишарових наноструктурах.

Предметом дослідження є математичні моделі дифузійних та субдифузійних процесів частинок у просторово-неоднорідних системах.

Методи дослідження. У роботі застосовано метод НСО Зубарєва, математичний апарат фрактального (дробового) числення [28], методи математичної фізики та підходи до їх використання до побудови рівнянь узагальненої дифузії у дробових похідних для просторово-неоднорідних систем.

Наукова новизна одержаних результатів:

- вперше виведено узагальнені рівняння електродифузії для носіїв заряду, які базуються на математичному апараті фрактального числення та методі НСО Зубарєва, що дало можливість описувати дифузійні та субдифузійні процеси у рамках статистики на основі ентропії Рені;

- вперше отримано узагальнені рівняння електродифузії типу Кеттано для систем з просторово-часовою фрактальністю, що уможливило моделювання субдифузійного імпедансу для мультишарових наноструктур та забезпечило якісне узгодження із експериментальними даними для системи GaSe з інкапсульованим β–циклодекстрином;

- вперше отримано рівняння q-дифузії в однокомпонентній системі частинок, які базуються на рівнянні Ліувілля у дробових похідних і методі НСО в статистиці Рені, що дало можливість моделювати просторово-часові залежності коефіцієнта дифузії при відповідних значеннях параметра Рені та встановлювати режими суб-, супер- та нормальної дифузії;

- вперше розроблено математичну модель кінетичних та гідродинамічних процесів у системі взаємодіючих частинок, що перебувають у нерівноважних станах, далеких від рівноваги, яка базується на узагальнених кінетичних рівняннях для нерівноважних одночастинкової та двочастинкової функцій розподілу, отриманих методом НСО оператора Зубарєва для класичних систем далеких від рівноваги у статистиці Рені, що дало можливість досліджувати залежності дифузійних процесів від узагальнених коефіцієнтів дифузії і тертя частинок у просторі координат та імпульсів.

Практичне значення одержаних результатів:

Математичне моделювання q-дифузії та метод розрахунку функції розсіювання, які вимірюються експериментально, можуть бути застосовані до математичного моделювання дифузійних процесів у просторово-неоднорідних системах. Математична модель для опису нелінійних кінетичних процесів переносу на основі узагальнених кінетичних рівнянь для нерівноважних одночастинкової та двочастинкової функцій розподілу частинок для класичних систем далеких від рівноваги може бути застосована для опису реакційно-дифузійних турбулентних процесів, які характерні для запропонованих у роботі математичних моделей.

Реалізація результатів та впровадження. Математичне моделювання субдифузійного імпедансу вже знайшло практичне застосування у поясненні експериментальних даних з імпедансної спектроскопії для мультишарових наноструктур, що отримані у дослідженнях на кафедрі прикладної фізики Національного університету "Львівська політехніка". Чисельне моделювання субдифузійного імпедансу на основі розробленої математичної моделі дало можливість проаналізувати та пояснити нелінійну природу явищ переносу заряду у мультишарових наноструктурах з фрактальною структурою на основі частотної залежності дійсної та уявної частин її узагальненого опору. Для практичного використання створено програмний продукт розрахунку імпедансних характеристик для моделювання субдифузійних процесів у реальних електролітичних батареях.

Результати дисертаційної роботи використано:

1. в ПАТ "Львівський електроламповий завод "ІСКРА"(для удосконалення технології виробництва освітлювальних приладів на основі світлодіодних пристроїв використано результати дослідження коефіцієнтів дифузії та моделей субдифузії);

2. в ТзОВ "Бескид-Біт"(викоритано моделі та підходи до аналізу процесів електодифузії у шаруватих напівпровідникових структурах та програмну технологію розрахунку коефіцієнтів дифузії, що дало можливість проаналізувати деякі результати дифузійних процесів у шаруватих кристалах та розробити нові технології виробництва сенсорів на їх основі).

Результати дисертаційної роботи використовуються також у навчальному процесі у Національному університеті "Львівська політехніка"в лекційних курсах "Стохастичні моделі систем"для студентів другого (магістерського) рівня вищої освіти (спеціальність 113 — "Прикладна математика освітньо-наукова програма "Прикладна математика") та "Випадкові процеси"для студентів 4-го курсу освітньо-кваліфікаційного рівня "бакалавр"(спеціальність 6.040301 — "Прикладна математика"). Акти про використання результатів дисертаційних досліджень наведено у Додатку.

Особистий внесок здобувача. Всі результати, отримані при вирішенні поставлених у дисертаційній роботі завдань, отримані автором самостійно. У наукових працях, опублікованих у співавторстві, автору належать: чисельне моделювання субдифузійного імпедансу на основі рівняння Кеттано у дробових похідних [32, 33]; аналіз частотної залежності дійсної та уявної частин узагальненого опору електролітичної системи, виведення узагальненого рівняння дифузії і рівняння електродифузії у дробових похідних на основі рівняння Ліувілля у дробових похідних для систем взаємодіючих частинок [34–38]; отримання у рамках статистики Рені методом НСО узагальненого рівняння дифузії, чисельний розрахунок коефіцієнта дифузії і функції розсіювання для модельної системи в залежності від параметра Рені [31]; детальний розрахунок та аналіз структури узагальнених функцій пам'яті при побудові математичної моделі опису кінетичних процесів [29,30]; участь у постановці задач, інтерпретація результатів, а також їх висвітлення на конференціях [39–41, 44–48].

Апробація результатів дисертації. Результати дисертаційної роботи доповідались та обговорювалися на таких наукових конференціях: VI Intern. Conf. "Physics of disordered systems"(Lviv, 2013); Наук.-техн. конф. "Мікрота нанонеоднорідні матеріали: моделі та експеримент"(INTERPOR'15) (Львів, 2015); Міжнар. міждисциплінарній наук. конф. студентів, аспірантів і молодих вчених "Science and Scientists"(Дніпропетровськ, 2015); Konf. Międzynar. Nauk.-Prakt. "Inżynieria i Technologia. Osiągnięcia Naukowe, Rozwój, Propozycje na rok 2015"(Warszawa, 2015); VII Всеукр. наук.-практ. конф. за міжнар. участю "Інформатика та системні науки"(ІСН–2016) (Полтава, 2016); 16-й Всеукр. школі-семінарі та Конкурсі молодих вчених із статистичної фізики та теорії конденсованої речовини Інституту фізики конденсованих систем НАН України (Львів, 2016); Bogolyubov Conf. on Problems of Theoretical Physics dedicated to the 50th anniversary of the Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of the NAS of Ukraine (Kyiv, 2016); Міжвузівському наук. семінарі, присвяченому 100-річчю від дня народження проф. Василя Павловича Рубаника (1917–1993) і 55-річчю кафедри прикладної математики та інформаційних технологій "Прикладні задачі та ІТ-технології"(Чернівці, 2017); XIV Міжнар. конф. "Функціональні та наноструктуровані матеріали"(FNMA'2017) і VII Міжнар. конф. "Фізика невпорядкованих систем"(PDS'2017) (Львів, 2017). Робота проходила апробацію на регулярних наукових семінарах кафедри прикладної математики Національного університету "Львівська політехніка"(2012–2017).

Публікації. Результати дисертації опубліковані у 20 роботах, серед яких 1 розділ у монографії [33], 4 статті у наукових фахових виданнях України [31, 32, 35, 36], 3 статті у наукових періодичних виданнях інших держав [30, 34, 37], 2 статті у наукових виданнях України [29, 38] та 10 тез наукових конференцій [39–48].

Структура та обсяг роботи. Дисертаційна робота складається зі вступу, п'ятьох розділів, висновків, списку використаних джерел та додатків. Загальний обсяг роботи складає 149 сторінок, з них 99 сторінок основного тексту. Робота містить 31 рисунок. Список використаних джерел охоплює 232 найменування.

Розділ 1

ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

У цьому розділі особлива увага приділяється дослідженням процесів аномальної дифузії у конденсованих системах, степеневим розподілам та відповідним статистикам Тсалліса та Рені, а також рівнянням дифузії Фоккера-Планка у дробових похідних. Проведено огляд робіт щодо моделювання субдифузійного імпедансу для електролітичних систем. Проведено огляд робіт щодо побудови рівнянь дифузії, кінетичних рівнянь у дробових похідних і дано короткий виклад рівняння Ліувілля у дробових похідних за роботами Тарасова [27, 49, 50]. Проведено огляд основних робіт щодо проблем необхідності узгодженого опису кінетичних та гідродинамічних процесів у густих газах та рідинах, далеких від рівноваги, коли багаточастинковими кореляціями, пов'язаними з локальними законами збереження, не можна нехтувати. Наприкінці розділу наведено стислий виклад методу НСО Зубарєва у статистиці Рені, за допомогою якого проводилися дослідження у роботі.

1.1 Математичне моделювання аномальних процесів дифузії

У дослідженнях явищ аномальної дифузії у пористих середовищах [3–6, 51–60], у невпорядкованих системах [61, 62], фізиці плазми [63–68], турбулентних [24, 69, 70], кінетичних і реакційно-дифузійних процесах [70–78], квантовій механіці [79–83] та інш [84, 85] інтеграли і похідні дробового порядку [28, 86] знайшли своє природне і необхідне застосування.

Є наявний значний експериментальний доробок про різні процеси аномальної дифузії, який вказує на те, що не тільки закон поширення, але і форма дифузійного пакету суттєво відрізняється від нормальної дифузії [52, 62, 70, 85]. Для опису аномальної дифузії у різних фізико-хімічних системах були розвинуті підходи із змінними коефіцієнтами дифузії [88], на основі степеневих кореляцій дробового порядку [89], дробових похідних [24, 69, 70], узагальнень рівняння Фоккера-Планка [3, 70, 90], узагальнень статистичної механіки (екстенсивної і неекстенсивної) на основі ентропії Тсалліса [91–93], Рені [91, 94] та інш. На базі проведених досліджень встановлено, що математичною основою аномальної дифузії є рівняння у дробових похідних [52, 70]. Зокрема, у роботах [52, 85, 95], досліджуючи тривимірні моделі аномальної дифузії, вдалося вивести основні рівняння аномальної дифузії із загальних принципів стохастичної теорії випадкових процесів на основі інтегральних рівнянь Чепмена-Колмогорова для ймовірностей переходу. Розв'язки цих рівнянь утворюють новий клас розподілів, названих дробово-стійкими. Тобто, дані розподіли є розв'язками рівнянь у частинних похідних дробового порядку, які узагальнюють звичайні рівняння дифузії на випадок аномальної дифузії. Частковим випадком дробово-стійких розподілів є розподіл Гауса, що відповідає нормальній дифузії. Важливо зазначити, що отримані рівняння для аномальної дифузії у дробових похідних містять коефіцієнт дифузії як сталу величину у часі і просторі. З іншої сторони, коефіцієнти дифузії зв'язані із часовими кореляційними функціями потік-потік (формули Гріна-Кубо), які містять механізми дифузійного переносу з точки зору нерівноважної статистичної механіки.

На даний час поряд із феноменологічними підходами побудови рівнянь Фоккера-Планка, рівняння дифузії, його узагальнення — рівняння Кеттано у дробових похідних, існують два підходи побудови таких рівнянь: ймовірнісний, виходячи із рівнянь Чепмена-Колмогорова в стохастичній теорії випадкових процесів [52, 70, 96] і статистичний, який базується на методі проекційних операторів (функцій памяті) в роботах [97–103, 105], а також на основі рівняння Ліувілля в дробових похідних, який розвиває Тарасов В. [8, 27, 49, 50, 106–115]. Зокрема, у такому підході отримано ланцюжок кінетичних рівнянь Боголюбов-Борн-Грін-Кірквуд-Івон (ББГКІ) у дробових похідних [27, 49, 111], рівняння переносу, рівняння дифузії та рівняння Гайзенберга [107–109] у дробових похідних. Такий підхід формулюється для негамільтонових систем, і у випадку виконання умов Гельмгольца для координатних та імпульсних похідних від узагальнених імпульсів та сил, переходимо до гамільтонових систем з оборотним у часі рівнянням Ліувілля у дробових похідних.

У роботі [116] запропоновано необоротні у часі рівняння руху Гамільтона та рівняння Ліувілля для динаміки класичних частинок у просторі з мультифрактальним часом. Використавши означення дробової похідної і інтегралу Рімана-Ліувілля, отримано необоротне у часі рівняння Ліувілля у дробових похідних з мультифрактальною часовою розмірністю. У роботах [117, 118] отримано кінетичні рівняння у підході Клімонтовича для систем з фрактальною структурою, зокрема для опису дифузійних процесів у просторі координат та імпульсу. Подібний підхід побудови дробово-часового узагальнення для рівняння Ліувілля та рівняння Цванцига (у формалізмі проектування) був запропонований у роботі [119]. Підхід на основі методу проекційних операторів (функцій памяті), який розвинутий у роботах [97–105] базується на моделюванні частотної залежності функцій памяті з використанням математичного апарату дробових похідних та інтегралів [28, 52, 86, 87]. У роботах Нігматулліна [97–99], фактично вперше отримані рівняння типу дифузії у дробових похідних за часом для середнього значення густини спіну [97], середнього значення вектора поляризації [98] та концентрації носіїв заряду [99]. У роботі [100] дано обгрунтування рівнянь у дробових похідних, та приведено необоротне у часі рівняння Ліувілля з дробовою похідною за часом. У такому підході отримано важливі результати, зокрема побудована мікроскопічна модель недебаєвської діелектричної релаксації, узагальнивши закон Cola-Cola [103], Cola-Davidson [101]. У [104] на основі фрактальної природи процесів переносу носіїв заряду досліджена низькочастотна поведінка провідності з врахуванням ефектів поляризації електрода, що добре узгоджується з експериментальними дослідженнями.

1.2 Рівняння Ліувілля у дробових похідних

Будемо розглядати нерівноважну функцію розподілу $\rho(x;t)$, де $x \epsilon R^1$, а t — час. Умова нормування має вигляд [27, 49, 50]:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\Gamma_N \rho(x;t) = 1. \tag{1.1}$$

Цю умову можна переписати у формі:

$$\int_{-\infty}^{y} d\Gamma_N \rho(x;t) + \int_{y}^{\infty} d\Gamma_N \rho(x;t) = 1, \tag{1.2}$$

$$d\Gamma_N = \frac{(dx)^N}{N!}, dx = dpdr,$$

де $y(-\infty, \infty)$, $L_1(R^1)$. Припустимо, що $\rho(x;t)\epsilon L_p(R^1)$, де $1 < p < \dfrac{1}{\alpha}$. Дробові інтеграли $(-\infty, y)$, (y, ∞) означимо відповідно [28]:

$$(I_+^\alpha \rho)(y,t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_{-\infty}^{y} \frac{\rho(x;t)}{(y-x)^{1-\alpha}} dx, (I_-^\alpha \rho)(y,t) \tag{1.3}$$

$$= \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_{y}^{\infty} \frac{\rho(x;t)}{(x-y)^{1-\alpha}} dx,$$

або

$$(I_\pm^\alpha \rho)(y,t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_{0}^{\infty} \rho(y \mp x;t) x^{\alpha-1} dx. \tag{1.4}$$

Це веде до умови нормування:

$$\frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_{0}^{\infty} (\rho(y-x;t) + \rho(y+x;t)) x^{\alpha-1} dx = 1. \tag{1.5}$$

Якщо ми позначимо

$$\tilde{\rho}(x;t) = \rho(y-x;t) + \rho(y+x;t) \tag{1.6}$$

і

$$d\mu_\alpha(x) = \frac{x^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)} dx, \tag{1.7}$$

то умову нормування можна переписати у вигляді:

$$\int_{0}^{\infty} \tilde{\rho}(x;t) d\mu_\alpha(x) = 1. \tag{1.8}$$

Далі будемо розглядати гамільтоновий опис. Нехай область зміни $x \epsilon B_0$ при $t = 0$. Тоді відповідно до теореми Ліувілля маємо:

$$\int_{B_t} \tilde{\rho}(x_t; t) d\mu_\alpha(x_t) = \int_{B_0} \tilde{\rho}(x_0; 0) d\mu_\alpha(x_0). \tag{1.9}$$

Використавши заміну змінних $x_t = x_t(x_0)$, отримаємо:

$$\int_{B_0} \tilde{\rho}(x_t; t) x_t^{\alpha-1} \frac{\partial x_t}{\partial x_0} dx_0 = \int_{B_0} \tilde{\rho}(x_0; 0) x_0^{\alpha-1} dx_0. \tag{1.10}$$

Оскільки B_0 є звичайна область, то відповідно до теореми Ліувілля також маємо:

$$\tilde{\rho}(x_t; t) d\mu_\alpha(x_t) = \tilde{\rho}(x_0; 0) d\mu_\alpha(x_0), \tag{1.11}$$

або

$$\tilde{\rho}(x_t; t) x_t^{\alpha-1} \frac{\partial x_t}{\partial x_0} dx_0 = \tilde{\rho}(x_0; 0) x_0^{\alpha-1} dx_0. \tag{1.12}$$

Продиференціювавши рівняння (1.12) за t, отримаємо:

$$\frac{d}{dt} \tilde{\rho}(x_t; t) x_t^{\alpha-1} \frac{\partial x_t}{\partial x_0} + \tilde{\rho}(x_t; t) \frac{d}{dt} \left(x_t^{\alpha-1} \frac{\partial x_t}{\partial x_0} \right) = 0, \tag{1.13}$$

або рівняння Ліувілля у дробових похідних [27]

$$\frac{d}{dt} \tilde{\rho}(x_t; t) + \Omega_\alpha(x_t; t) \tilde{\rho}(x_t; t) = 0, \tag{1.14}$$

де

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + F_t \frac{\partial}{\partial x_t}, F_t = \frac{d}{dt} x_t$$

і

$$\Omega_\alpha(x_t; t) = \frac{d}{dt} \ln \left(x_t^{\alpha-1} \frac{\partial x_t}{\partial x_0} \right) = \frac{(\alpha-1) F_t}{x_t} + \frac{\partial}{\partial x_t} F_t. \tag{1.15}$$

Далі ми застосуємо даний підхід до опису динаміки частинок у фазовому просторі координат r_t та імпульсу p_t. Тоді умова нормування для $\tilde{\rho}(r, p; t)$ рівна:

$$\int_0^\infty \int_0^\infty \tilde{\rho}(r,p;t)d\mu_\alpha(r,p;t) = 1, \tag{1.16}$$

де

$$d\mu_\alpha(r,p;t) = d\mu_\alpha(r;t)d\mu_\alpha(p;t)\frac{dr^\alpha \wedge dp^\alpha}{(\alpha\Gamma(\alpha))^2}$$

і

$$\tilde{\rho}(r,p;t) = \tilde{\rho}(r'-r,p'-p;t) + \tilde{\rho}(r'+r,p'-p;t) + \tilde{\rho}(r'-r,p'+p;t)+$$

$$+\tilde{\rho}(r'+r,p'+p;t).$$

З врахуванням теореми Ліувілля для $\tilde{\rho}(r,p;t)$ у відповідності (1.3) — (1.15) рівняння Ліувілля [27] можна подати у вигляді:

$$\frac{d}{dt}\tilde{\rho}(r,p;t) + \Omega_\alpha(r,p;t)\tilde{\rho}(r,p;t) = 0, \tag{1.17}$$

де

$$\Omega_\alpha(r,p;t) = \left\{\frac{dr_t^\alpha}{dt}, p_t^\alpha\right\}_\alpha + \left\{r_t^\alpha, \frac{dp_t^\alpha}{dt}\right\}_\alpha$$

і

$$\{A,B\}_\alpha = \frac{\partial A}{\partial r^\alpha}\frac{\partial B}{\partial p^\alpha} - \frac{\partial A}{\partial p^\alpha}\frac{\partial B}{\partial r^\alpha}$$

— узагальнені дужки Пуасона. Рівняння Ліувілля у дробових похідних для N взаємодіючих частинок із відповідним силами отримано у [27, 49, 50].

1.3 Кінетика та гідродинаміка конденсованих систем, далеких від рівноваги. Статистика Тсалліса та Рені

Вивчення нелінійних флуктуацій у густих газах, рідинах, густій плазмі, у процесах турбулентності, динаміці фазових переходів, хімічних реакціях, процесах самоорганізації залишаються актуальними в теоретичній і математичній фізиці [26, 120–137] як на кінетичному так і на гідродинамічному рівні опису.

Нерівноважні стани таких систем далекі від рівноваги. Тому, з одного боку, є важливим вивчення процесів, які приводять до появи стійких станів з характерними часами життя, і з іншого — дослідження процесів релаксації системи до нерівноважних станів, які вже добре вивчені, наприклад, у випадку густих газів, рідин до станів, які описуються в рамках теорії молекулярної гідродинаміки [138–141].

Важливо відзначити, що однією із важливих особливостей нерівноважних явищ у густих газах, рідинах (складних рідинах), густій плазмі (пиловій плазмі) є те, що кінетичні і гідродинамічні процеси необхідно розглядати узгоджено [142–146]. У таких дослідженнях застосовуються різні статистичні підходи на основі ентропій Гіббса-Шеннона [25, 147–150] і її узагальнень ентропії Тсалліса [151], Рені [20, 24, 152], Шарми-Міттала [153, 154], а також суперстатистики [155–157].

При дослідженні складних фізичних систем і явищ, зокрема самоорганізаційних та фрактальних структур, субдифузії, турбулентності, хімічних реакцій, а також різних економічних, соціальних і біологічних систем розподіл Гіббса не забезпечує узгодження із спостережуваними явищами. Як виявляється у багатьох дослідженнях, для таких систем характерні степеневі розподіли [52, 158]. Вони не отримуються із принципу максимуму ентропії Гіббса-Шеннона, на якому грунтується як рівноважна, так і нерівноважна статистична термодинаміка [25, 147, 148, 159]. Це спричинило численні спроби побудови узагальненої статистики, яка б забезпечила степеневу асимптотику функції розподілу. Така узагальнена статистика може бути побудована на основі кількох ентропій. Серед них важливе місце посідають ентропія Рені та ентропія Тсалліса.

Ентропія Тсалліса широко використовується у різних напрямках неекстенсивної статистичної механіки (див. роботи [19, 160, 161] і посилання на літературу у них). Важливим прикладами є явища субдифузії [136, 162] і турбулентності [163, 164], дослідження коефіцієнтів переносу у газах і плазмі [165], а також квантових дисипативних систем [166]. В рамках формалізму Тсалліса досліджувались флуктуації енергії [167], кінетика нерівноважної плазми [168], проблеми самогравітаційних [169] і складних систем [170, 171]. У роботах [172–174] статистика Тсалліса застосовувалась до моделювання процесів хімічних реакцій, зокрема, до нелінійних рівнянь реакційно-дифузійних процесів які були отримані у роботі [172].

Поряд із широким застосуванням ентропії Тсалліса як узагальнення ентропії Гіббса-Шеннона, ентропія Рені також представляє великий інтерес [175–184]. Зокрема, у цьому випадку індекс q можна пов'язати з теплоємністю системи [179]. Важливо відзначити роботи [185, 186], у яких метод нерівноважного статистичного оператора і ентропія Рені використовується для опису системи далеких від рівноваги. Зокрема, нерівноважний q-залежний розподіл Рені, а також узагальнені функції розподілу бозонів і ферміонів були отримані у роботі [185], у якій у цьому підході були також описані експерименти по аномальній люмінісценсії у нанометрових квантових точках у напівпровідникових гетероструктурах. Статистичний підхід для опису фрактальних фізико-хімічних систем на основі нефіковських дифузійних процесів був запропонований у роботі [186]. Там проводились дослідження аномальної дифузії у фракталоподібних електродах мікробатарей. Неекстенсивний підхід [187] як і інші підходи [188, 189], які приводять до рівняння Лінбланда, використовувались для опису явищ декогеренції у квантовій механіці. Роботи [137, 190, 191] присвячені дослідженням нелінійної кінетики на основі рівнянь Крамерса, Больцмана і Фоккера-Планка в рамках узагальненої статистики.

У роботах О.Г. Башкірова [177, 179–181] для опису складних систем пропонується використання ентропії Рені [20, 152] як статистичної ентропії, що залежить від параметра q $(0 < q \leqslant 1)$ і при $q = 1$ співпадає з ентропією Гіббса-Шеннона. Виходячи із принципу максимуму ентропії Рені для рівноважного випадку отримано степеневий розподіл Рені, який при $q = 1$ переходить у канонічний розподіл Гіббса. $\eta = 1 - q$ розглядається як параметр порядку, при його рості статистична ентропія Рені зростає до свого максимуму, якому відповідає степеневий розподіл Рені. Причому, при $\eta = 0$ похідна від ентропії Рені за параметром η має скачок, тобто має місце свого роду фазовий перехід системи у більш впорядкований рівноважний стан. Властивості ентропії Рені розглянуто у книгах [152, 155, 192].

Важливо зазначити, що ентропія Тсалліса є лінійним наближенням ентропії Рені при розкладі останньої у ряд в околі $q = 1$. Результатом такої апроксимації є важлива особливість, — ентропія Тсалліса стає неадетивною.

Ентропії Рені та Тсалліса можуть бути зв'язані за допомогою простої монотонної функції. Тому екстримізація однієї з них, так само як і нормованої ентропії Тсалліса [193, 194], при однакових умовах призводить до степеневих розподілів одного і того ж вигляду. Незважаючи на це, ентропії Рені та Тсалліса сильно відрізняються, і ці відмінності є важливими при дослідженні термодинамічних систем. Наприклад, ентропія Тсалліса є вгнутою функцією для всіх $q > 0$, тоді як ентропія Рені вгнута лише для $0 < q < 1$. В роботі [195] було запропоновано спосіб дослідження узагальнених ентропій на стійкість. Зокрема, було показано, що ентропія Рені є нестійкою для всіх $q \neq 0$. У свою чергу Абе [196, 197] показав стійкість ентропії Тсалліса для всіх $q > 0$ та нестікість нормованої ентропії Тсалліса.

1.4 Метод нерівноважного статистичного оператора Зубарєва в статистиці Рені

Одним із важливих методів дослідження у теорії нерівноважних процесів є метод нерівноважного статистичного оператора Зубарєва [25, 147, 148, 159]. Він успішно застосовувався до проблем кінетичної теорії, гідродинаміки рідин, газів, плазми, фізики твердого тіла, фізичної хімії та ін. Проведені нами дослідження базуються на цьому методі, тому наведемо його короткий опис.

В основі методу нерівноважного статистичного оператора лежить ідея скороченого опису системи, запропонована М.М. Боголюбовим [198], яка полягає у тому, що нерівноважний макроскопічний стан системи описується набором спостережуваних величин $\langle \hat{P}_m \rangle^t$, що є середніми значеннями базисних динамічних змінних $\hat{P}_m$. За допомогою цих змінних здійснюється огрублений опис еволюції системи на вибраній шкалі часу. У методі нерівноважного статистичного оператора рівняння переносу для середніх значень $\langle \hat{P}_m \rangle^t$ вибраного набору динамічних змінних отримуються з допомогою нерівноважної функції розподілу $\varrho(x^N; t)$, яка знаходиться як розв'язок рівняння Ліувілля з граничною умовою. Шукаються такі розв'язки рівняння Ліувілля

$$\frac{\partial}{\partial t}\varrho(x^N; t) + iL_N \varrho(x^N; t) = 0, \tag{1.18}$$

з початковою умовою

$$\varrho(x^N;t)_{t=t_0} = \varrho_{rel}(x^N;t_0),$$

що залежать від часу тільки через значення деякого набору спостережуваних змінних, достатнього для опису нерівноважного стану системи, і не залежать від вибору початкового моменту часу, де введено позначення

$$\langle \ldots \rangle^t = \int d\Gamma_N (\ldots) \varrho(x^N;t),$$

а функція $\varrho(x^N;t)$ є симетричною відносно перестановок $x_l \leftrightarrow x_j$ фазових змінних будь-якої пари частинок і задовольняє умові нормування

$$\int d\Gamma_N \varrho(x^N;t) = 1, d\Gamma = (dx)^N/N!,$$

$dx = d\vec{p}d\vec{r}$. $x = \{\vec{p},\vec{r}\}$ — координати фазового простору частинок.

Шуканий розв'язок рівняння Ліувілля для $\varrho(x^N;t)$ може бути записаний у вигляді [25, 147, 148, 159]:

$$\varrho(x^N;t) = \varepsilon \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)} e^{iL_N(t'-t)} \varrho_{rel}(x^N;t')dt', \tag{1.19}$$

звідки після інтегрування за частинами, отримаємо:

$$\varrho(x^N;t) = \varrho_{rel}(x^N;t) - \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)} e^{iL_N(t'-t)} \left(\frac{\partial}{\partial t'} + iL_N\right) \varrho_{rel}(x^N;t')dt',$$

або з врахуванням проектування, яке виключає часові похідні від $\varrho_{rel}(x^N;t)$ [25, 147, 148, 159]:

$$\begin{aligned} \varrho(x^N;t) &= \varrho_{rel}(x^N;t) - \\ &- \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)} T(t,t') \left(1 - P_{rel}(t')\right) iL_N \varrho_{rel}(x^N;t')dt', \end{aligned} \tag{1.20}$$

де $\varepsilon \to +0$ після термодинамічного граничного переходу. iL_N — оператор Ліувілля взаємодіючих частинок масою m з координатами $\vec{r}_j$, імпульсами $\vec{p}_j$ та парним потенціалом взаємодії $\Phi\left(|\vec{r}_{lj}|\right)$, що у загальному випадку задається співвідношенням

$$iL_N = \sum_{l=1}^{N} \frac{\vec{p}_l}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}_l} - \frac{1}{2} \sum_{l \neq j=1}^{N} \frac{\partial}{\partial \vec{r}_l} \Phi(r_{lj}) \left(\frac{\partial}{\partial \vec{p}_l} - \frac{\partial}{\partial \vec{p}_j} \right). \tag{1.21}$$

$T_q(t,t')$ — оператор еволюції у часі з врахуванням проектування:

$$T(t,t') = \exp_+ \left\{ - \int_{t'}^{t} \left(1 - P_{rel}(t'')\right) iL_N dt'' \right\}, \tag{1.22}$$

$P_{rel}(t)$ — проекційний оператор Кавасакі-Гантона, що входить у рівняння (1.20) і визначається структурою функції $\varrho_{rel}(x^N;t)$. Він діє на функції розподілу за правилом

$$P_{rel}(t)\varrho' = \left\{ \varrho_{rel}(x^N;t) - \sum_n \frac{\delta \varrho_{rel}(x^N;t)}{\delta \langle \hat{P}_n \rangle^t} \langle \hat{P}_n \rangle^t \right\} \int \varrho' d\Gamma_N \tag{1.23}$$

$$+ \sum_n \frac{\delta \varrho_{rel}(x^N;t)}{\delta \langle \hat{P}_n \rangle^t} \int \hat{P}_n \varrho' d\Gamma_N$$

та володіє операторними властивостями:

$$P_{rel}(t)\varrho(x^N;t) = \varrho_{rel}(x^N;t), P_{rel}(t)\varrho_{rel}(x^N;t) = \varrho_{rel}(x^N;t),$$

$$P_{rel}(t)P_{rel}(t') = P_{rel}(t).$$

У даному розділі $\varrho(x^N;t)$ будемо шукати методом нерівноважного статистичного оператора з використанням принципу максимуму ентропії Рені [26]. Тобто $\varrho_{rel}(x^N;t)$ будемо шукати із умови максимуму функціоналу ентропії Рені системи:

$$S^R(\varrho) = \frac{1}{1-q} \ln \int d\Gamma_N \varrho^q(t). \tag{1.24}$$

При фіксованих параметрах скороченого опису

$$\int d\Gamma_N \hat{P}_n \varrho(x^N;t) = \langle \hat{P}_n \rangle^t$$

та збережені умови нормування

$$\int d\Gamma_N \varrho_{rel}(x^N;t) = 1$$

функціонал матиме вигляд

$$L^R(\varrho) \;=\; \frac{1}{1-q}\ln\int d\Gamma_N \varrho^q(t) - \alpha\int d\Gamma_N \varrho(t) - \tag{1.25}$$

$$-\sum_n F_n(t)\int d\Gamma_N \hat{P}_n \varrho(t),$$

де $F_n(t)$ — множники Лагранжа. Прирівнявши до нуля функціональну похідну від $L^R(\varrho)$

$$\frac{\delta L^R(\varrho)}{\delta\varrho} = \frac{q}{1-q}\frac{\varrho^{q-1}(t)}{\int d\Gamma_N \varrho^q(t)} - \alpha - \sum_n F_n(t)\hat{P}_n = 0, \tag{1.26}$$

отримаємо релевантний статистичний оператор, знайдений із принципу максимуму ентропії Рені [26]

$$\varrho_{rel}(t) = \frac{1}{Z_R}\left(1 - \frac{q-1}{q}\sum_n F_n(t)\delta\hat{P}_n\right)^{\frac{1}{q-1}}, \tag{1.27}$$

$$Z_R(t) = \int d\Gamma_N \left(1 - \frac{q-1}{q}\sum_n F_n(t)\delta\hat{P}_n\right)^{\frac{1}{q-1}} \tag{1.28}$$

— статистична сума релевантного статистичного оператора, $\delta\hat{P}_n = \hat{P}_n - \langle\hat{P}_n\rangle^t$, а параметр α у (1.25) визначається співвідношенням

$$\alpha = \frac{q}{1-q} - \sum_n F_n(t)\langle\hat{P}_n\rangle^t. \tag{1.29}$$

Параметри Лагранжа $F_n(t)$ у (1.27) та (1.28) визначаються із умов самоузгодження:

$$\left\langle\hat{P}_n\right\rangle^t = \left\langle\hat{P}_n\right\rangle^t_{rel}. \tag{1.30}$$

Оскільки релевантний статистичний оператор визначений для основного набору параметрів скороченого опису, то ми можемо знайти нерівноважний статистичний оператор, розкривши структуру проекційного оператора:

$$P_{rel}(t)\varrho' = \left(\varrho_{rel}(t) - \sum_n \frac{\delta\varrho_{rel}(t)}{\delta\langle\hat{P}_n\rangle^t}\langle\hat{P}_n\rangle^t\right)\int d\Gamma_N\varrho' + \tag{1.31}$$

$$+\sum_n \frac{\delta\varrho_{rel}(t)}{\delta\langle\hat{P}_n\rangle^t}\int d\Gamma_N\hat{P}_n\varrho'.$$

Варіаційну похідну від релевантного статистичного оператора у проекційному операторі можна подати у вигляді:

$$\frac{\delta\varrho_{rel}(t)}{\delta\langle\hat{P}_m\rangle^t} = \varrho_{rel}(t)\delta\left[\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\left(F_m(t) - \sum_n \frac{\delta F_n(t)}{\delta\langle\hat{P}_m\rangle^t}\delta\hat{P}_n\right)\right], \tag{1.32}$$

де

$$\delta\left[\ldots\right] = \left[\ldots\right] - \langle[\ldots]\rangle_{rel}^t \tag{1.33}$$

і введено позначення

$$\psi(t) = 1 - \frac{q-1}{q}\sum_n F_n(t)\delta\hat{P}_n. \tag{1.34}$$

Похідну від множників Лагранжа за параметрами скороченого опису $\delta F_n(t)/\delta\langle\hat{P}_m\rangle^t$ будемо розраховувати наступним чином

$$\frac{\delta F_n(t)}{\delta\langle\hat{P}_m\rangle^t} = \left(\frac{\delta\langle\hat{P}_m\rangle^t}{\delta F_n(t)}\right)^{-1}. \tag{1.35}$$

Це можна зробити у загальному випадку, тому

$$\frac{\delta\langle\hat{P}_m\rangle^t}{\delta F_n(t)} = \frac{\delta\langle\hat{P}_m\rangle^t_{rel}}{\delta F_n(t)} = \int d\Gamma_N\hat{P}_m\frac{\delta\varrho_{rel}(t)}{\delta F_n(t)}. \tag{1.36}$$

Розрахувавши $\delta\varrho_{rel}(t)/\delta F_n(t)$ у правій частині співвідношення (1.36), отримаємо рівняння для знаходження похідних

$$\frac{\delta\langle\hat{P}_m\rangle^t}{\delta F_n(t)} = \frac{1}{q}\left\langle\delta\hat{P}_m\psi^{-1}(t)\right\rangle^t_{rel}\sum_l\frac{\delta\langle\hat{P}_l\rangle^t}{\delta F_n(t)} - \frac{1}{q}\left\langle\delta\hat{P}_m\psi^{-1}(t)\delta\hat{P}_n\right\rangle^t_{rel}. \tag{1.37}$$

Його розв'язок у матричному вигляді наступний:

$$\frac{\delta\langle\hat{P}\rangle^t}{\delta F(t)} = -\left[I - \frac{1}{q}\left\langle\delta\hat{P}\psi^{-1}(t)\right\rangle_{rel}^t F\right]^{-1}\frac{1}{q}\left\langle\delta\hat{P}\psi^{-1}(t)\delta\hat{P}\right\rangle_{rel}^t = f(t), \tag{1.38}$$

де

$$\frac{\delta\langle\hat{P}_m\rangle^t}{\delta F_n(t)} = \left(\frac{\delta\langle\hat{P}\rangle^t}{\delta F(t)}\right)_{mn} = f_{mn}(t). \tag{1.39}$$

Тепер функціональну похідну запишемо у вигляді:

$$\frac{\delta\varrho_{rel}(t)}{\delta\langle\hat{P}_m\rangle^t} = \varrho_{rel}(t)\delta\left[\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\left(F_m(t) + \sum_n f_{mn}^{-1}(t)\delta\hat{P}_n\right)\right]. \tag{1.40}$$

Тоді проекційний оператор Кавасакі-Гантона буде мати наступну структуру:

$$\begin{aligned} P_{rel}(t)\varrho' = \Big(\varrho_{rel}(t) - \sum_m \varrho_{rel}(t)\delta\times \qquad\qquad\qquad\qquad & \qquad (1.41)\\ \times\left[\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\left(F_m(t) + \sum_n f_{mn}^{-1}(t)\delta\hat{P}_n\right)\right]\langle\hat{P}_m\rangle^t\int d\Gamma_N\{\varrho'\}\Big)\times &\\ +\sum_m \varrho_{rel}(t)\delta\left[\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\left(F_m(t) + \sum_n f_{mn}^{-1}(t)\delta\hat{P}_n\right)\right]\int d\Gamma_N\{\hat{P}_m\varrho'\}, & \end{aligned}$$

або

$$\begin{aligned} P_{rel}(t)\varrho' \;=\; \varrho_{rel}(t)\int d\Gamma_N\{\varrho'\} + \qquad\qquad & \qquad (1.42)\\ +\sum_m \varrho_{rel}(t)\delta\left[\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\left(F_m(t) + \sum_n f_{mn}^{-1}(t)\delta\hat{P}_n\right)\right]\times &\\ \times\left(\int d\Gamma_N\{\hat{P}_m\varrho'\} - \langle\hat{P}_m\rangle^t\int d\Gamma_N\{\varrho'\}\right). & \end{aligned}$$

Далі необхідно розкрити дію операторів $P_{rel}(t)iL_N$ на релевантний статистичний оператор. Оскільки

$$iL_N\varrho_{rel}(t) = -\varrho_{rel}(t)\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\sum_n F_n(t)\dot{\hat{P}}_n = A(t)\varrho_{rel}(t), \tag{1.43}$$

то

$$P_{rel}(t)iL_N\varrho_{rel}(t) = P(t)A(t)\varrho_{rel}(t) = \int d\Gamma_N\left\{A(t)\varrho_{rel}(t)\right\} + \tag{1.44}$$

$$+\sum_m \varrho_{rel}(t)\delta\left[\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\left(F_m(t) + \sum_n f_{mn}^{-1}(t)\delta\hat{P}_n\right)\right]\times$$

$$\times\left(\int d\Gamma_N\{\hat{P}_m A\varrho_{rel}(t)\} - \langle\hat{P}_m\rangle^t\int d\Gamma_N\{A(t)\varrho_{rel}(t)\}\right),$$

де

$$\int d\Gamma_N\{\hat{P}_m A(t)\varrho_{rel}(t)\}- \tag{1.45}$$

$$-\langle\hat{P}_m\rangle^t\int d\Gamma_N\left\{A(t)\varrho_{rel}(t)\right\} = \left\langle\delta\hat{P}_m A(t)\right\rangle_l^t.$$

Таким чином,

$$P_{rel}(t)iL_N\varrho_{rel}(t) = P_{rel}(t)A(t)\varrho_{rel}(t) = (P(t)A(t))\varrho_{rel}(t),$$

де $P(t)$ — проекційний оператор, що діє на динамічні змінні:

$$P(t)\ldots \;=\; \langle\ldots\rangle_{rel}+ \tag{1.46}$$

$$+\sum_m \delta\left[\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\left(F_m(t) + \sum_n f_{mn}^{-1}(t)\delta\hat{P}_n\right)\right]\langle\ldots\delta\hat{P}_m\rangle_{rel}.$$

Оскільки

$$A(t) = -\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\sum_n F_n(t)\dot{\hat{P}}_n, \tag{1.47}$$

то

$$P(t)A(t) = -\frac{1}{q}\sum_n F_n(t)\left\langle\psi^{-1}(t)\dot{\hat{P}}_n\right\rangle_{rel} + \tag{1.48}$$
$$+\sum_m \delta\left[\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\left(F_m(t)+\sum_l f^{-1}_{ml}(t)\delta\hat{P}_l\right)\right] +$$
$$\times\Bigg\langle\left[-\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\sum_n F_n(t)\dot{\hat{P}}_n - \frac{1}{q}\sum_n F_n(t)\langle\psi^{-1}(t)\dot{\hat{P}}_n\rangle_{rel}\right] +$$
$$\times(\hat{P}_m - \langle\hat{P}_m\rangle_{rel})\Bigg\rangle_{rel}$$

Розкривши дію операторів $P_{rel}(t)iL_N$, $(1 - P_{rel}(t))iL_N\varrho_{rel}(t)$ можна подати у вигляді:

$$(1 - P_{rel}(t))\, iL_N\varrho_{rel}(t) = (1 - P(t))\, iL_N\varrho_{rel}(t) = \tag{1.49}$$
$$= -\sum_n I_n(t)F_n(t)\varrho_{rel}(t),$$

де

$$I_n(t) = (1 - P(t))\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\dot{\hat{P}}_n \tag{1.50}$$

— узагальнені потоки. Тепер можна записати нерівноважний статистичний оператор (нерівноважну функцію розподілу), у явному вигляді, врахувавши (1.49) [26]

$$\varrho(x^N;t) = \varrho_{rel}(x^N;t)+ \tag{1.51}$$
$$+\sum_n \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}T(t,t')I_n(t')F_n(t')\varrho_{rel}(x^N;t')dt',$$

за допомогою якого для параметрів скороченого опису отримуються узагальнені рівняння переносу, які можна записати у вигляді:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{P}_m\rangle^t = \langle\dot{\hat{P}}_m\rangle^t_{rel} + \sum_n\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\varphi_{mn}(t,t')F_n(t')dt',$$

де

$$\varphi_{mn}(t,t') = \int d\Gamma_N\{\dot{\hat{P}}_m T(t,t')I_n(t')\varrho_{rel}(t')\} \tag{1.52}$$

— узагальнені ядра переносу (функції пам'яті), які описують дисипативні процеси в системі і побудовані на узагальнених потоках $I_n(t)$. Рівняння переносу (1.52), в загальному випадку враховують ефекти пам'яті, у наближені

$$\varphi_{mn}(t,t') \approx \varphi_{mn}\delta(t-t')$$

описують марковські процеси. Рівняння переносу є незамкнутими. Нерівноважні множники Лагранжа у них (нерівноважні термодинамічні параметри у випадку гідродинамчного опису) визначаються із умов самоузгоджень (1.30). З цієї точки зору система рівнянь переносу стає замкнутою. Нерівноважний статистичний оператор (1.51) і рівняння переносу (1.52) складають повний інструмент для моделювання нерівноважних процесів в системах далеких від рівноваги, коли означені параметри скороченого опису $\langle\hat{P}_n\rangle^t$.

1.5 Висновки до розділу 1

1. За проведеним оглядом робіт показано важливість досліджень кінетичних та дифузійних (аномальних) процесів у системах далеких від рівноваги.

2. Для математичного моделювання важливою проблемою є отримання рівнянь переносу (дифузії, гідродинаміки) у дробових похідних в рамках мікроскопічної теорії взаємодіючих частинок, зокрема для фрактальних систем.

Розділ 2

УЗАГАЛЬНЕНІ РІВНЯННЯ ТИПУ ДИФУЗІЇ У ДРОБОВИХ ПОХІДНИХ

Розглядаєтся рівняння Ліувілля у дробових похідних для класичної системи частинок, запропоноване Тарасовим [27, 49]. В методі нерівноважного статистичного оператора знаходиться загальний розв'язок рівняння Ліувілля у дробових похідних, за допомогою якого виводиться узагальнене рівняння дифузії у дробових похідних. Для математичного моделювання процесів переносу носіїв заряду у мультишарових структурах, що характеризуються фрактальною структурою виводяться узагальнені рівняння електродифузії у дробових похідних, виходячи із рівняння Ліувілля у дробових похідних на основі методу нерівноважного статистичного оператора Зубарєва і ентропії Рені. Основні результати опубліковані у [34, 35, 47, 48].

2.1 Рівняння Ліувілля у дробових похідних для класичної системи частинок

Ми будемо виходити із рівняння Ліувілля у дробових похідних для нерівноважної функції частинок $\rho(x^N;t)$ класичної системи, отриманого у роботах В. Тарасова [27, 49, 50, 106]:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x^N;t) + \sum_{j=1}^{N} D^{\alpha}_{\vec{r}_j}\left(\rho(x^N;t)\vec{v}_j\right) + \sum_{j=1}^{N} D^{\alpha}_{\vec{p}_j}\left(\rho(x^N;t)\vec{F}_j\right) = 0, \tag{2.1}$$

де $x^N = x_1, \ldots, x_N$, $x_j = \{\vec{r}_j, \vec{p}_j\}$ — розмірні узагальнені координати $\vec{r}_j = r_{j1}...r_{jm}$ і розмірні узагальнені імпульси $\vec{p}_j = p_{j1}...p_{jm}$ [107] j-ої частинки у фазовому просторі з фрактальним диференціальним елементом об'ємом [27, 227] $d^\alpha V = d^\alpha x_1 .... d^\alpha x_N$. Тут, $m = \dfrac{Mr_0}{p_0 t_0}$, M — маса частинок, r_0 — характерна довжина в конфігураційному просторі, p_0 — характерне значення імпульсу і t_0 — характерний час. d^α — фрактальний диференціал [227], що означений наступним чином:

$$d^\alpha f(x) = \sum_{j=1}^{2N} D^\alpha_{x_j} f(x)(dx_j)^\alpha,$$

де

$$D^\alpha_x f(x) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_0^x \frac{f^{(n)}(z)}{(x-z)^{\alpha+1-n}} dz \tag{2.2}$$

— фрактальна похідна Капуто [28, 86, 228, 229], $n - 1 < \alpha < n$,

$$f^{(n)}(z) = \frac{d^n}{dz^n} f(z)$$

з властивостями: $D^\alpha_{x_j} 1 = 0$ і $D^\alpha_{x_j} x_l = 0$, $(j \neq l)$.

У загальному випадку

$$D^\alpha_{\vec{r}_j}(\rho(x^N;t)\vec{F}_j) \neq \rho(x^N;t) D^\alpha_{\vec{r}_j} \vec{F}_j + \vec{F}_j D^\alpha_{\vec{r}_j} \rho(x^N;t).$$

Якщо $\vec{F}_j$ не залежать від $\vec{p}_j$, а $\vec{v}_j$ не залежать від $\vec{r}_j$, і виконуються умови Гельмгольца:

$$\frac{\partial v_j}{\partial p_l} - \frac{\partial v_l}{\partial p_j} = 0,$$

$$\frac{\partial v_j}{\partial r_l} + \frac{\partial F_l}{\partial p_j} = 0,$$

$$\frac{\partial F_j}{\partial r_l} - \frac{\partial F_l}{\partial r_j} = 0,$$

ми отримаємо:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x^N;t) + \sum_{j=1}^{N} \vec{v}_j D^\alpha_{\vec{r}_j} \rho(x^N;t) + \sum_{j=1}^{N} \vec{F}_j D^\alpha_{\vec{p}_j} \rho(x^N;t) = 0,$$

$$\vec{v}_j = D^{\alpha}_{\vec{p}_j} H(\vec{r},\vec{p}), \vec{F}_j = -D^{\alpha}_{\vec{r}_j} H(\vec{r},\vec{p}),$$

де $H(\vec{r},\vec{p})$ — гамільтоніан системи в дробових похідних. Тому отримаємо рівняння Ліувілля у вигляді:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x^N;t) \ + \ \sum_{j=1}^{N} D^{\alpha}_{\vec{p}_j} H(\vec{r},\vec{p}) D^{\alpha}_{\vec{r}_j}\rho(x^N;t) - \tag{2.3}$$

$$-\sum_{j=1}^{N} D^{\alpha}_{\vec{r}_j} H(\vec{r},\vec{p}) D^{\alpha}_{\vec{p}_j}\rho(x^N;t) = 0,$$

або

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x^N;t) + iL_\alpha\rho(x^N;t) = 0, \tag{2.4}$$

де iL_α — оператор Ліувілля у дробових похідних:

$$iL_\alpha\rho(x^N;t) = \left(\sum_{j=1}^{N} D^{\alpha}_{\vec{p}_j} H(\vec{r},\vec{p}) D^{\alpha}_{\vec{r}_j} - \sum_{j=1}^{N} D^{\alpha}_{\vec{r}_j} H(\vec{r},\vec{p}) D^{\alpha}_{\vec{p}_j}\right)\rho(x^N;t). \tag{2.5}$$

Розв'язок рівняння Ліувілля (2.4) будемо шукати методом нерівноважного статистичного оператора Д. Зубарєва [25, 159], у якому, коли вибрані основні параметри скороченого опису, $\rho\left(x^N;t\right)$ може бути представлений (як розв'язок рівняння Ліувілля) в загальній формі з врахуванням проектування:

$$\rho(x^N;t) \ = \ \rho_{rel}\left(x^N;t\right) - \tag{2.6}$$

$$-\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)} T(t,t')\left(1 - P_{rel}(t')\right) iL_\alpha\rho_{rel}\left(x^N;t'\right)dt',$$

де

$$T(t,t') = \exp_+\left(-\int_{t'}^{t}\left(1 - P_{rel}(t')\right) iL_\alpha dt'\right)$$

— оператор еволюції з врахуванням проектування; $\varepsilon \longrightarrow +0$ після граничного термодинамічного переходу, $\exp_+$ — впорядкована експонента, $P_{rel}(t')$ —

узагальнений оператор проектування Кавасакі-Гантона, структура якого залежить від структури $\rho_{rel}(x^N;t')$ — релевантного (функції розподілу) статистичного оператора. У методі НСО [25, 148, 159], $\rho_{rel}\left(x^N;t'\right)$ будемо шукати на основі підходу [26] із екстремуму функціоналу ентропії Рені при фіксованих значеннях спостережуваних величин $\langle\hat{P}_n(x)\rangle_\alpha^t$ і збережені умови нормування $\langle 1\rangle_{\alpha,rel}^t = 1$, де нерівноважні середні значення знаходяться відповідно [27, 50, 68, 106]:

$$\langle\hat{P}_n(x)\rangle_\alpha^t = \hat{I}^\alpha(1,....,N)\hat{T}(1,....,N)\hat{P}_n\rho(x^N;t), \tag{2.7}$$

де для системи N частинок $\hat{I}^\alpha(1,....,N)$ має наступний вигляд:

$$\hat{I}^\alpha(1,....,N) = \hat{I}^\alpha(1),....,\hat{I}^\alpha(N), \hat{I}^\alpha(j) = \hat{I}^\alpha(\vec{r}_j)\hat{I}^\alpha(\vec{p}_j)$$

і означають операції інтегрування:

$$\hat{I}^\alpha(x)f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)d\mu_\alpha(x), d\mu_\alpha(x) = \frac{|x|^\alpha}{\Gamma(\alpha)}dx. \tag{2.8}$$

Оператор $\hat{T}(1,....,N) = \hat{T}(1),....,\hat{T}(N)$ означає операцію:

$$\hat{T}(x_j)f(x_j) = \frac{1}{2}\left(f(...x'_j - x_j...) + f(...x'_j + x_j...)\right).$$

Відповідно середні значення за релевантною функцією розподілу означаються як

$$\langle(....)\rangle_{\alpha,rel}^t = \hat{I}^\alpha(1,....,N)\hat{T}(1,....,N)(....)\rho_{rel}(x^N;t).$$

Тоді релевантна функція розподілу відповідно [26] буде мати наступний вигляд:

$$\rho_{rel}(x^N;t) \;=\; \frac{1}{Z_R(t)}\times \tag{2.9}$$

$$\times\left(1 - \frac{q-1}{q}\left(\beta\left(H - \sum_n \int d\mu_\alpha(x)F_n(x;t)\delta\hat{P}_n(x;t)\right)\right)\right)^{\frac{1}{q-1}},$$

де $Z_R(t)$ — статистична сума розподілу Рені, що визначається із умови нормування і має вигляд:

$$Z_R(t) = \hat{I}^{\alpha}(1,..,N)\hat{T}(1,..,N)\times \tag{2.10}$$
$$\left(1-\frac{q-1}{q}\left(\beta\left(H-\sum_n\int d\mu_\alpha(x)F_n(x;t)\delta\hat{P}_n(x;t)\right)\right)\right)^{\frac{1}{q-1}},$$

а параметри $F_n(x;t)$ визначаються із умов самоузгодження:

$$\langle\hat{P}_n(x)\rangle^t_\alpha = \langle\hat{P}_n(x)\rangle^t_{\alpha,rel}. \tag{2.11}$$

В загальному випадку параметрів скороченого опису $\langle\hat{P}_n(x)\rangle^t_\alpha$ нерівноважних процесів відповідно до (2.6) і (2.9) отримуємо нерівноважний статистичний оператор у вигляді:

$$\rho(t) = \rho_{rel}(t)+$$
$$+\sum_n\int d\mu_\alpha(x)\int\limits_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}T(t,t')I_n(x;t')\rho_{rel}(t')\beta F^*_n(x;t')dt', \tag{2.12}$$

де

$$F^*_n(x;t') = \frac{F_n(x;t')}{1+\frac{q-1}{q}\sum_n\int d\mu_\alpha(x)F_n(x;t')\left\langle P_n(x)\right\rangle^t_\alpha},$$

$$I_n(x;t') = (1-P(t))\,\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)iL_\alpha\hat{P}_n(x) \tag{2.13}$$

— узагальнені потоки, $P(t)$ — проекційний оператор Морі, а функція $\psi(t)$ має наступну структуру

$$\psi(t) = 1-\frac{q-1}{q}\sum_n\int d\mu_\alpha(x)F_n(x;\dot{t})P_n(x).$$

За допомогою нерівноважного статистичного оператора (2.12) отримується узагальнене рівняння переносу для параметрів скороченого опису $\langle\hat{P}_n(x)\rangle^t_\alpha$:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left\langle\hat{P}_n(x)\right\rangle^t_\alpha = \left\langle iL_\alpha\hat{P}_n(x)\right\rangle^t_{\alpha,rel}+$$
$$+\sum_{n'}\int d\mu_\alpha(x')\int\limits_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\varphi_{P_nP_{n'}}(x,x';t,t')\beta F^*_{n'}(x';t')dt', \tag{2.14}$$

де

$$\varphi_{P_n P_{n'}}(x,x';t,t') = \hat{I}^{\alpha}(1,\dots,N)\hat{T}(1,\dots,N)\times \tag{2.15}$$
$$\times\Big(iL_{\alpha}\hat{P}_n(x)T(t,t')I_{n'}(x';t')\rho_{rel}(x^N;t')\Big)$$

— узагальнені ядра переносу (функції пам'яті), які описують дисипативні процеси в системі. Для розкриття структури рівнянь переносу (2.14) і ядер переносу (2.15) розглянемо для прикладу електродифузійні процеси.

У наступному підрозділі ми розглянемо конкретний приклад процесів дифузії частинок у просторово неоднорідній системі.

2.2 Узагальнене рівняння дифузії у дробових похідних

Для опису дифузійних процесів у класичних просторово неоднорідних системах основним параметром скороченого опису є нерівноважна густина числа частинок $n(\vec{r}_{\alpha};t) = \langle \hat{n}(\vec{r})\rangle^t_{\alpha}$, де

$$n(\vec{r}) = \sum_{j=1}^{N}\delta(\vec{r}-\vec{r}_j)$$

— мікроскопічна густина числа частинок. При такому наборі параметрів скороченого опису релевантна функція розподілу буде мати вигляд:

$$\rho_{rel}(x^N;t) = \frac{1}{Z_R(t)}\times \tag{2.16}$$
$$\times\left(1-\frac{q-1}{q}\left(\beta\left(H-\int d\mu_{\alpha}(\vec{r})\nu(\vec{r};t)\delta\hat{n}(\vec{r}_{\alpha};t)\right)\right)\right)^{\frac{1}{q-1}},$$

де

$$Z_R(t) \;=\; \hat{I}^{\alpha}(1,..,N)\hat{T}(1,..,N)\times \tag{2.17}$$
$$\times\left(1-\frac{q-1}{q}\left(\beta\left(H-\int d\mu_{\alpha}(\vec{r})\nu(\vec{r};t)\delta\hat{n}(\vec{r}_{\alpha};t)\right)\right)\right)^{\frac{1}{q-1}}$$

— статистична сума релевантної функції розподілу, де $\beta = \dfrac{1}{k_{\text{Б}} T}$, $k_{\text{Б}}$ — константа Больцмана, T — рівноважна температура, $\delta\hat{n}(\vec{r}_\alpha;t) = \hat{n}(\vec{r}) - \langle \hat{n}(\vec{r}) \rangle^t_\alpha$ — флуктуації густини, а параметр $\nu(\vec{r};t)$ визначається із умови самоузгодження:

$$\langle \hat{n}(\vec{r}) \rangle^t_\alpha = \langle \hat{n}(\vec{r}) \rangle^t_{\alpha,rel} . \tag{2.18}$$

Важливо зазначити, що при $q = 1$ релевантна функція розподілу (2.16) в статистиці Рені переходить у розподіл статистики Гіббса [159]. Розподіл (2.16) можна подати у вигляді:

$$\rho_{rel}(x^N;t) = \frac{1}{Z_R(t)} \left(1 - \frac{q-1}{q} \left(\beta \left(H - \int d\mu_\alpha(\vec{r}) \nu^*(\vec{r};t) \hat{n}(\vec{r}) \right) \right) \right)^{\frac{1}{q-1}}, \tag{2.19}$$

де

$$\begin{aligned} Z_R(t) \;&=\; \hat{I}^\alpha(1,..,N)\, \hat{T}(1,..,N) \times \qquad (2.20) \\ &\times \left(1 - \frac{q-1}{q} \left(\beta \left(H - \int d\mu_\alpha(\vec{r}) \nu^*(\vec{r};t) \hat{n}(\vec{r}) \right) \right) \right)^{\frac{1}{q-1}}, \end{aligned}$$

$$\nu^*(\vec{r};t) = \frac{\nu(\vec{r};t)}{1 + \dfrac{q-1}{q} \displaystyle\int d\mu_\alpha(\vec{r}) \nu(\vec{r};t) \langle \hat{n}(\vec{r}) \rangle^t_\alpha}.$$

Підставивши (2.19) у (2.6), для нерівноважного статистичного оператора:

$$\begin{aligned} \rho(x^N;t) \;&=\; \rho_{rel}(x^N;t) + \int_{-\infty}^t e^{\varepsilon(t'-t)} T(t,t') \qquad (2.21) \\ &\times \int d\mu_\alpha(\vec{r}\,') I_n(\vec{r}\,'_\alpha;t') \rho_{rel}(t) \nu^*(\vec{r}\,';t) dt', \end{aligned}$$

де

$$I_n(\vec{r}_\alpha;t) = (1 - P(t)) \frac{1}{q} \psi^{-1}(t) i L_\alpha \hat{n}(\vec{r}) \tag{2.22}$$

— узагальнений потік, у якому функція $\psi(t)$ рівна

$$\psi(t) = 1 - \frac{q-1}{q} \beta \left(H - \int d\mu_\alpha(\vec{r}) \nu^*(\vec{r};t) \hat{n}(\vec{r}) \right)$$

$P(t)$ — проекційний оператор, що має наступну структуру:

$$P(t)\ldots = \int d\mu_\alpha(\vec{r}) \int d\mu_\alpha(\vec{r}^{\,\prime}) \left\langle \ldots \hat{n}(\vec{r})\right\rangle^t_{\alpha,rel} \times$$

$$\times \left[\left\langle \hat{n}(\vec{r})\delta\left\{[q\psi(t)]^{-1}\hat{n}(\vec{r}^{\,\prime})\right\}\right\rangle^t_{\alpha,rel}\right]^{-1} \delta\left\{[q\psi(t)]^{-1}\hat{n}(\vec{r}^{\,\prime})\right\},$$

де $\delta\{A\} = A - \langle A\rangle^t_{\alpha,rel}$.

За допомогою нерівноважного статистичного оператора (2.21) для параметра скороченого опису можна отримати узагальнене рівняння дифузії:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{n}(\vec{r})\rangle^t_\alpha = \int d\mu_\alpha(\vec{r}^{\,\prime}) \int_{-\infty}^t e^{\varepsilon(t^{\prime}-t)}\phi_{nn}(\vec{r},\vec{r}^{\,\prime};t,t^{\prime})\beta\nu^*(\vec{r}^{\,\prime};t^{\prime})dt^{\prime}, \tag{2.23}$$

де

$$\varphi_{nn}(\vec{r},\vec{r}^{\,\prime};t,t^{\prime}) = \hat{I}^\alpha(1,..,N)\hat{T}(1,..,N)iL_\alpha\hat{n}(\vec{r})T(t,t^{\prime})I_n(\vec{r}^{\,\prime}_\alpha;t^{\prime})\rho_{rel}(x^N;t^{\prime}) =$$

$$= \frac{\partial^\alpha}{\partial\vec{r}^\alpha}\cdot D_q(\vec{r},\vec{r}^{\,\prime};t,t^{\prime})\cdot\frac{\partial^\alpha}{\partial\vec{r}^{\,\prime\alpha}}$$

— узагальнене ядро переносу, у якому усереднення виконується із степеневим розподілом (2.19). В результаті отримуємо немарковське рівняння дифузії у дробових похідних

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{n}(\vec{r})\rangle^t_\alpha = \frac{\partial^\alpha}{\partial\vec{r}^\alpha}\cdot\int d\mu_\alpha(\vec{r}^{\,\prime})\int_{-\infty}^t e^{\varepsilon(t^{\prime}-t)}D_q(\vec{r},\vec{r}^{\,\prime};t,t^{\prime})\cdot \tag{2.24}$$

$$\cdot\frac{\partial^\alpha}{\partial\vec{r}^{\,\prime\alpha}}\beta\nu^*(\vec{r}^{\,\prime};t^{\prime})dt^{\prime},$$

$$D_q(\vec{r},\vec{r}^{\,\prime};t,t^{\prime}) = \left\langle\hat{\vec{v}}(\vec{r})T(t,t^{\prime})\hat{\vec{v}}(\vec{r}^{\,\prime})\right\rangle^t_{\alpha,rel} = \tag{2.25}$$

$$= \hat{I}^\alpha(1,..,N)\hat{T}(1,..,N)\hat{\vec{v}}(\vec{r})T(t,t^{\prime})\hat{\vec{v}}(\vec{r}^{\,\prime})\times$$

$$\times\frac{1}{Z_R(t)}\left(1-\frac{q-1}{q}\beta\left(H-\int d\mu_\alpha(\vec{r})\nu^*(\vec{r};t)\hat{n}(\vec{r})\right)\right)^{\frac{1}{q-1}}$$

— узагальнений коефіцієнт дифузії в статистиці Рені, у якому усереднення виконується із степеневим розподілом (2.19), де

$$\hat{\vec{v}}(\vec{r}) = \sum_{j=1}^{N} \vec{v}_j \delta(\vec{r} - \vec{r}_j)$$

— мікроскопічна густина потоку числа частинок. При $q = 1$ узагальнене рівняння дифузії в статистиці Рені переходить в узагальнене рівняння дифузії статистики Гіббса у дробових похідних. Коли ж $q = 1$ і $\alpha = 1$, то приходимо до узагальненого рівняння дифузії статистики Гіббса [159]. У наближені Маркова для узагальненого коефіцієнта дифузії у часі і просторі

$$D_q(\vec{r}, \vec{r}^{\,\prime}; t, t^{\prime}) \approx D_q \delta(t - t^{\prime}) \delta(\vec{r} - \vec{r}^{\,\prime}),$$

виключивши параметр $\nu^*(\vec{r}^{\,\prime}; t^{\prime})$ за допомогою умови самоузгодження, із (2.24) отримаємо рівняння дифузії у дробових похідних:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{n}(\vec{r}) \rangle_{\alpha}^{t} = D_q \frac{\partial^{2\alpha}}{\partial r^{2\alpha}} \langle \hat{n}(\vec{r}) \rangle_{\alpha}^{t} . \tag{2.26}$$

Отже, на основі рівняння Ліувілля у дробових похідних, запропонованого Тарасовим [50, 67, 68, 106] для класичної системи частинок з використанням методу нерівноважного статистичного оператора Зубарєва [25, 26, 148, 159], отримано узагальнене (немарковське) рівняння дифузії у дробових похідних. Використано також принцип максимуму ентропії Рені. На основі такого підходу при вибраному наборі параметрів скороченого опису $\langle \hat{P}_n(x) \rangle_{\alpha}^{t}$ нерівноважного стану системи, можуть бути отримані узагальнені рівняння переносу в дробових похідних. Зокрема, у випадку, коли за такі параметри вибрані нерівноважні середні значення густин числа частинок, імпульсу та енергії, отримаємо узагальнені рівняння гідродинаміки у дробових похідних, що узагальнюють результати Тарасова [110].

2.3 Узагальнене рівняння електродифузії для носіїв заряду у дробових похідних

Для опису електродифузійних процесів носіїв заряду у неоднорідних середовищах з фрактальною структурою основним параметром скороченого опису є нерівноважна густина числа носіїв заряду сорту b $n_b(\vec{r}_\alpha;t) = \langle \hat{n}_b(\vec{r}) \rangle_\alpha^t$, де

$$n_b(\vec{r}) = \sum_{j=1}^{N_b} \delta(\vec{r} - \vec{r}_j)$$

— мікроскопічна густина носіїв заряду сорту b. Для отримання рівняння переносу для $n_b(\vec{r}_\alpha;t)$ використаємо методику підрозділу 2.2.

При такому наборі параметрів скороченого опису релевантна функція розподілу буде мати вигляд:

$$\rho_{rel}(x^N;t) = \frac{1}{Z_R(t)} \times \tag{2.27}$$

$$\times \left(1 - \frac{q-1}{q}\beta\left(H - \sum_b \int d\mu_\alpha(\vec{r})\nu_b(\vec{r};t)\delta\hat{n}_b(\vec{r}_\alpha;t)\right)\right)^{\frac{1}{q-1}},$$

де

$$Z_R(t) = \hat{I}^\alpha(1,..,N)\hat{T}(1,..,N) \times \tag{2.28}$$

$$\times \left(1 - \frac{q-1}{q}\beta\left(H - \sum_b \int d\mu_\alpha(\vec{r})\nu_b(\vec{r};t)\delta\hat{n}_b(\vec{r}_\alpha;t)\right)\right)^{\frac{1}{q-1}}$$

— статистична сума релевантної функції розподілу, $\delta\hat{n}_b(\vec{r}_\alpha;t) = \hat{n}_b(\vec{r}) - \langle \hat{n}_b(\vec{r}) \rangle_\alpha^t$ – флуктуації густини, а параметр

$$\nu_b(\vec{r};t) = \gamma_b(\vec{r};t) + Z_b e \varphi(\vec{r};t)$$

— електрохімічний потенціал носіїв заряду валентності Z_b, який визначається із умови самоузгодження:

$$\langle \hat{n}_b(\vec{r}) \rangle_\alpha^t = \langle \hat{n}_b(\vec{r}) \rangle_{\alpha,rel}^t . \tag{2.29}$$

Важливо зазначити, що при $q = 1$ релевантна функція розподілу (2.27) в статистиці Рені переходить у розподіл статистики Гіббса. Розподіл (2.27) можна подати у вигляді:

$$\rho_{rel}(x^N;t) = \frac{1}{Z_R(t)} \times \tag{2.30}$$

$$\times \left(1 - \frac{q-1}{q}\beta \left(H - \sum_b \int d\mu_\alpha(\vec{r}) \nu_b^*(\vec{r};t) \hat{n}_b(\vec{r})\right)\right)^{\frac{1}{q-1}},$$

де

$$Z_R(t) = \hat{I}^\alpha(1,..,N)\hat{T}(1,..,N) \times \tag{2.31}$$

$$\times \left(1 - \frac{q-1}{q}\beta \left(H - \sum_b \int d\mu_\alpha(\vec{r}) \nu_b^*(\vec{r};t) \hat{n}_b(\vec{r})\right)\right)^{\frac{1}{q-1}},$$

$$\nu_b^*(\vec{r};t) = \frac{\nu_b(\vec{r};t)}{1 + \frac{q-1}{q} \sum_b \int d\mu_\alpha(\vec{r}) \nu_b(\vec{r};t) \langle \hat{n}_b(\vec{r}) \rangle_\alpha^t}.$$

Підставивши (2.30) у (2.6), для нерівноважного статистичного оператора отримаємо:

$$\rho(x^N;t) = \rho_{rel}(x^N;t) + \tag{2.32}$$

$$+ \sum_b \int_{-\infty}^t e^{\varepsilon(t'-t)} T(t,t') \int d\mu_\alpha(\vec{r}') I_n^b(\vec{r}'_\alpha, t') \rho_{rel}(t') \beta \nu_b^*(\vec{r}';t') dt',$$

де

$$I_n^b(\vec{r}_\alpha;t) = (1 - P(t)) \frac{1}{q} \psi^{-1}(t) iL_\alpha \hat{n}_b(\vec{r}) \tag{2.33}$$

– узагальнений потік, у якому функція $\psi(t)$ дорівнює

$$\psi(t) = 1 - \frac{q-1}{q}\beta \left(H - \sum_b \int d\mu_\alpha(\vec{r}) \nu_b^*(\vec{r};t) \hat{n}_b(\vec{r})\right),$$

$P(t)$ – проекційний оператор, що має таку структуру:

$$P(t)\ldots = \sum_{ab}\int d\mu_\alpha(\vec{r})\int d\mu_\alpha(\vec{r}')\,\langle\ldots\hat{n}_a(\vec{r})\rangle^t_{\alpha,rel}\times$$

$$\times\left[\left\langle\hat{n}(\vec{r})\delta\left\{[q\psi(t)]^{-1}\hat{n}(\vec{r}')\right\}\right\rangle^t_{\alpha,rel}\right]^{-1}_{ab}\delta\left\{[q\psi(t)]^{-1}n_b(\vec{r}')\right\},$$

де $\delta\{A\} = A - \langle A\rangle^t_{\alpha,rel}$.

За допомогою нерівноважного статистичного оператора (2.32) для параметра скороченого опису можна отримати узагальнене рівняння електродифузії для носіїв заряду:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{n}_a(\vec{r})\rangle^t_\alpha = \sum_b\int d\mu_\alpha(\vec{r}')\int_{-\infty}^t e^{\varepsilon(t'-t)}\phi^{ab}_{nn}(\vec{r},\vec{r}';t,t')\beta\nu^*_b(\vec{r}';t')dt', \tag{2.34}$$

де

$$\varphi^{ab}_{nn}(\vec{r},\vec{r}';t,t') = \hat{I}^\alpha(1,..,N)\hat{T}(1,..,N)iL_\alpha\hat{n}_a(\vec{r})T(t,t')I^b_n(\vec{r}'_\alpha;t')\rho_{rel}(x^N;t') =$$

$$= \frac{\partial^\alpha}{\partial\vec{r}^\alpha}\cdot D^{ab}_q(\vec{r},\vec{r}';t,t')\cdot\frac{\partial^\alpha}{\partial\vec{r}'^\alpha}$$

— узагальнене ядро переносу, в якому усереднення виконується із степеневим розподілом (2.30). В результаті отримуємо немарковське рівняння електродифузії у дробових похідних

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{n}_a(\vec{r})\rangle^t_\alpha = \tag{2.35}$$

$$\frac{\partial^\alpha}{\partial\vec{r}^\alpha}\cdot\sum_b\int d\mu_\alpha(\vec{r}')\int_{-\infty}^t e^{\varepsilon(t'-t)}D^{ab}_q(\vec{r},\vec{r}';t,t')\cdot\frac{\partial^\alpha}{\partial\vec{r}'^\alpha}\beta\nu^*_b(\vec{r}';t')dt' =$$

$$= \frac{\partial^\alpha}{\partial\vec{r}^\alpha}\cdot\sum_b\int d\mu_\alpha(\vec{r}')\int_{-\infty}^t e^{\varepsilon(t'-t)}D^{ab}_q(\vec{r},\vec{r}';t,t')\cdot\frac{\partial^\alpha}{\partial\vec{r}'^\alpha}\times$$

$$\times\frac{\nu_b(\vec{r}';t')}{1+\dfrac{q-1}{q}\displaystyle\sum_b\int d\mu_\alpha(\vec{r})\nu_b(\vec{r};t)\langle\hat{n}_b(\vec{r})\rangle^t_\alpha}dt',$$

$$D_q^{ab}(\vec{r},\vec{r}';t,t') = \left\langle \hat{\vec{v}}_a(\vec{r})T(t,t')\hat{\vec{v}}_b(\vec{r}')\right\rangle^t_{\alpha,rel} = \tag{2.36}$$

$$= \hat{I}^{\alpha}(1,..,N)\hat{T}(1,..,N)\hat{\vec{v}}_a(\vec{r})T(t,t^{'})\hat{\vec{v}}_b(\vec{r}^{'})\times$$

$$\times\frac{1}{Z_R(t)}\left(1-\frac{q-1}{q}\beta\left(H-\sum_b\int d\mu_\alpha(\vec{r})\nu_b^*(\vec{r};t)\hat{n}_b(\vec{r})\right)\right)^{\frac{1}{q-1}}$$

— узагальнений коефіцієнт взаємної дифузії носіїв заряду сортів a і b в статистиці Рені, в якому усереднення виконується із степеневим розподілом (2.30), де

$$\hat{\vec{v}}_a(\vec{r}) = \sum_{j=1}^{N_a}\vec{v}_j\delta(\vec{r}-\vec{r}_j)$$

— мікроскопічна густина потоку числа частинок. Немарковське рівняння електродифузії (2.35), як бачимо за структурою сильно нелійне і може описувати нерівноважні процеси переносу заряду у станах далеких від рівноваги. Більше того, вони можуть використовуватись і при сильних електричних полях, які входять через $\dfrac{\partial^\alpha}{\partial\vec{r}^\alpha}\varphi(\vec{r};t) = \vec{E}_\alpha(\vec{r};t)$, оскільки $\nu_b(\vec{r};t) = \gamma_b(\vec{r};t) + Z_b e\varphi(\vec{r};t)$.

При $q = 1$ узагальнене рівняння електродифузії в статистиці Рені переходить в узагальнене рівняння електродифузії статистики Гіббса у дробових похідних:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{n}_a(\vec{r})\rangle^t_\alpha = \tag{2.37}$$
$$\frac{\partial^\alpha}{\partial\vec{r}^\alpha}\cdot\sum_b\int d\mu_\alpha(\vec{r}^{'})\int_{-\infty}^t e^{\varepsilon(t'-t)}D^{ab}(\vec{r},\vec{r}^{'};t,t^{'})\cdot\frac{\partial^\alpha}{\partial\vec{r}^{'\alpha}}\beta(\nu_b(\vec{r}';t')+Z_b e\varphi(\vec{r}';t'))dt'$$

Коли ж $q = 1$ і $\alpha = 1$, то приходимо до узагальненого рівняння електродифузії статистики Гіббса. У наближені Маркова для узагальненого коефіцієнта взаємної дифузії у часі і просторі

$$D_q^{ab}(\vec{r},\vec{r}';t,t') \approx D_q^{ab}\delta(t-t')\delta(\vec{r}-\vec{r}'),$$

із (2.36) отримуємо рівняння електродифузії у дробових похідних:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left\langle \hat{n}_a(\vec{r})\right\rangle^t_\alpha = \sum_b D^{ab}_q \frac{\partial^{2\alpha}}{\partial r^{2\alpha}} \nu^*_b(\vec{r}';t') = \tag{2.38}$$

$$= \sum_b D^{ab}_q \frac{\partial^{2\alpha}}{\partial r^{2\alpha}} \frac{\nu_b(\vec{r};t)}{1 + \dfrac{q-1}{q}\sum_b \int d\mu_\alpha(\vec{r})\nu_b(\vec{r};t)\left\langle \hat{n}_b(\vec{r})\right\rangle^t_\alpha}.$$

При цьому виникають проблеми знаходження скалярного потенціалу $\varphi(\vec{r};t)$ (оскільки $\nu_b(\vec{r};t) = \gamma_b(\vec{r};t) + Z_b e\varphi(\vec{r};t)$) електромагнітного поля для системи з фрактальною структурою. Взагалі рівняння (2.38) повинні бути узгоджені із рівняннями Максвелла, проблеми побудови яких для системи з фрактальною структурою обговорювались у роботах [67, 68]. При $q = 1$ із (2.38) отримуємо рівняння електродифузії в статистиці Гіббса:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left\langle \hat{n}_a(\vec{r})\right\rangle^t_\alpha = \sum_b D^{ab}_q \frac{\partial^{2\alpha}}{\partial r^{2\alpha}} (\gamma_b(\vec{r}';t') + Z_b e\varphi(\vec{r}';t')). \tag{2.39}$$

Узагальнене рівняння електродифузії враховує просторову фрактальність системи та ефекти пам'яті в узагальненому коефіцієнті взаємної дифузії носіїв заряду $D^{ab}_q(\vec{r},\vec{r}';t,t')$ в статистиці Рені. Просторова фрактальність системи очевидно впливає на процеси переносу носіїв заряду, що може проявлятися як часова мультифрактальність із характерними часами релаксації. Відомо, що нерівноважні кореляційні функції $D^{ab}_q(\vec{r},\vec{r}';t,t')$ точно неможливо розрахувати, тому використовують певні наближення, виходячи із фізичних міркувань. У часовому інтервалі $(-\infty \div t)$ процеси переносу носіїв заряду у просторово неоднорідній системі можуть характеризуватись сукупністю часів релаксації, які пов'язані із характером взаємодії носіїв заряду з частинками середовища з фрактальною структурою, що пов'язані з поляризаційними ефектами, впливом електромагнітного поля. Зокрема, у недавній роботі [104] автори враховували ефекти поляризації електрода при дослiджені частотної залежності провідності, правильна поведінка якої була отримана з врахуванням фрактальності процесів переносу носіїв заряду шляхом моделювання функцій пам'яті. Для розкриття часової мультифрактальності в узагальненому рівнянні електродифузії використаємо наступне наближення для узагальненого коефіцієнта взаємної дифузії носіїв заряду:

$$D_q^{ab}(\vec{r},\vec{r}';t,t') = W_a(t,t')\overline{D}_q^{ab}(\vec{r},\vec{r}'), \tag{2.40}$$

де $W_a(t,t')$ можна означити як функцію пам'яті у часі. З врахуванням цього рівняння (2.34) можна подати у вигляді:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left\langle \hat{n}_a(\vec{r})\right\rangle_\alpha^t = \int\limits_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)} W_a(t,t')\Psi_a(\vec{r};t')dt', \tag{2.41}$$

де

$$\Psi_a(\vec{r};t') = \sum_b \int d\mu_\alpha(\vec{r}')\frac{\partial^\alpha}{\partial \vec{r}^\alpha}\cdot\overline{D}_q^{ab}(\vec{r},\vec{r}')\cdot\frac{\partial^\alpha}{\partial \vec{r}'^\alpha}\beta\nu_b^*(\vec{r}';t'). \tag{2.42}$$

Далі застосуємо перетворення Фур'є до рівняння (2.41), в результаті у частотному зображенні отримаємо:

$$i\omega n_a(\vec{r};\omega) = W_a(\omega)\Psi_a(\vec{r};\omega). \tag{2.43}$$

Частотну залежність функції пам'яті подамо у вигляді, із введенням часу релаксації τ_a (який характеризує процеси переносу носіїв заряду в системі):

$$W_a(\omega) = \frac{(i\omega)^{1-\xi}}{1+i\omega\tau_a}, 0 < \xi \leq 1. \tag{2.44}$$

Тоді рівняння (2.43) можна подати у вигляді:

$$(1+i\omega\tau_a)i\omega n_a(\vec{r};\omega) = (i\omega)^{1-\xi}\Psi_a(\vec{r};\omega). \tag{2.45}$$

Далі використаємо перетворення Фур'є до дробових похідних від функцій:

$$L\left({}_0D_t^{1-\xi}f(t);i\omega\right) = (i\omega)^{1-\xi}L(f(t);i\omega). \tag{2.46}$$

З його використанням, зворотне перетворення у рівнянні (2.45) до часової залежності, дає узагальнене рівняння електродифузії типу Кеттано з врахуванням просторово-часової фрактальності:

$$\tau_a\frac{\partial^2}{\partial t^2}n_a(\vec{r};t) + \frac{\partial}{\partial t}n_a(\vec{r};t) = {}_0D_t^{1-\xi}\Psi_a(\vec{r};t) = \frac{\partial^{1-\xi}}{\partial t^{1-\xi}}\Psi_a(\vec{r};t), \tag{2.47}$$

або в розгорнутому вигляді:

$$\tau_a \frac{\partial^2}{\partial t^2} n_a(\vec{r};t) + \frac{\partial}{\partial t} n_a(\vec{r};t) = \tag{2.48}$$

$$= {}_0D_t^{1-\xi} \sum_b \int d\mu_\alpha(\vec{r}') \frac{\partial^\alpha}{\partial \vec{r}^\alpha} \cdot \overline{D}_q^{ab}(\vec{r},\vec{r}') \cdot \frac{\partial^\alpha}{\partial \vec{r}'^\alpha} \beta \nu_b^*(\vec{r}';t),$$

— узагальнене (нове) рівняння типу Каттано в статистиці Рені із часовою мультифрактальністю і просторовою фрактальністю. При $q = 1$ із (2.48) отримаємо узагальнене рівняння типу Каттано в статистиці Гібса із часовою мультифрактальністю і просторовою фрактальністю:

$$\tau_a \frac{\partial^2}{\partial t^2} n_a(\vec{r};t) + \frac{\partial}{\partial t} n_a(\vec{r};t) = \tag{2.49}$$

$$= {}_0D_t^{1-\xi} \sum_b \int d\mu_\alpha(\vec{r}') \frac{\partial^\alpha}{\partial \vec{r}^\alpha} \cdot \overline{D}^{ab}(\vec{r},\vec{r}') \cdot \frac{\partial^\alpha}{\partial \vec{r}'^\alpha} \beta (\gamma_b(\vec{r}';t) + Z_b e \varphi(\vec{r}';t)),$$

Важливо зазначити, що у правих частинах у рівняннях (2.47), (2.49) входить дробова похідна від скалярного потенціалу електромагнітного поля $\frac{\partial^\alpha}{\partial \vec{r}'^\alpha} \beta Z_b e \varphi(\vec{r}';t)$, що вказує на необхідність врахування системи рівнянь Максвела у дробових похідних для системи з просторовою фрактальністю для повноти опису процесів переносу носіїв заряду у такому середовищі. Рівняння (2.47), (2.49) містять суттєву просторову неоднорідність у $\overline{D}_q^{ab}(\vec{r},\vec{r}')$. Якщо знехтувати просторовою неоднорідністю:

$$\overline{D}_q^{ab}(\vec{r},\vec{r}') = \overline{D}_q^{ab} \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \tag{2.50}$$

то отримаємо

$$\tau_a \frac{\partial^2}{\partial t^2} n_a(\vec{r};t) + \frac{\partial}{\partial t} n_a(\vec{r};t) = {}_0D_t^{1-\xi} \sum_b \overline{D}_q^{ab} \frac{\partial^{2\alpha}}{\partial \vec{r}^{2\alpha}} \beta \nu_b^*(\vec{r};t), \tag{2.51}$$

— рівняння дифузії типу Каттано із просторовою і часовою фрактальністю із сталими коефіцієнтами взаємної дифузії в статистиці Рені, або в розгорнутому вигляді:

$$\tau_a \frac{\partial^2}{\partial t^2} n_a(\vec{r};t) + \frac{\partial}{\partial t} n_a(\vec{r};t) = {}_0D_t^{1-\xi} \sum_b \overline{D}_q^{ab} \frac{\partial^{2\alpha}}{\partial \vec{r}^{2\alpha}} \times \tag{2.52}$$

$$\times \beta \frac{\nu_a(\vec{r};t)}{1 + \dfrac{q-1}{q} \displaystyle\sum_a \int d\mu_\alpha(\vec{r}) \nu_a(\vec{r};t) \left\langle \hat{n}_a(\vec{r}) \right\rangle_\alpha^t},$$

і при $q = 1$

$$\tau_a \frac{\partial^2}{\partial t^2} n_a(\vec{r};t) + \frac{\partial}{\partial t} n_a(\vec{r};t) = {}_0D_t^{1-\xi} \sum_b \overline{D}^{ab} \frac{\partial^{2\alpha}}{\partial \vec{r}^{2\alpha}} \nu_a(\vec{r};t), \tag{2.53}$$

— узагальнене рівняння типу Каттано із просторовою і часовою фрактальністю із сталими коефіцієнтами взаємної дифузії в статистиці Гіббса.

Важливо зазначити, що коли у рівняннях (2.51) (2.53) покласти $\alpha = 1$, тобто знехтувати просторовою фрактальністю, то отримаємо рівняння дифузії типу Каттано, які були отримані у роботах [5, 209]:

$$\tau_a \frac{\partial^2}{\partial t^2} n_a(\vec{r};t) + \frac{\partial}{\partial t} n_a(\vec{r};t) = {}_0D_t^{1-\xi} \sum_b \overline{D}^{ab} \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} \nu_a(\vec{r};t). \tag{2.54}$$

При $\tau_a = 0$ ми отримуємо важливий частковий випадок — узагальнені рівняння електродифузії носіїв заряду з врахуванням часової і просторової фрактальності:

$$\frac{\partial}{\partial t} n_a(\vec{r};t) = {}_0D_t^{1-\xi} \sum_b \int d\mu_\alpha(\vec{r}') \frac{\partial^\alpha}{\partial \vec{r}^\alpha} \cdot \overline{D}_q^{ab}(\vec{r},\vec{r}') \cdot \frac{\partial^\alpha}{\partial \vec{r}'^\alpha} \beta \nu_b^*(\vec{r}';t), \tag{2.55}$$

і при нехтуванні просторової неоднорідності коефіцієнтів взаємної дифузії $\overline{D}_q^{ab}(\vec{r},\vec{r}')$ також отримуємо:

$$\frac{\partial}{\partial t} n_a(\vec{r};t) = {}_0D_t^{1-\xi} \sum_b \overline{D}_q^{ab} \frac{\partial^{2\alpha}}{\partial \vec{r}^{2\alpha}} \beta \nu_b^*(\vec{r};t), \tag{2.56}$$

— рівняння електродифузії із сталими коефіцієнтами взаємної дифузії у дробових похідних в статистиці Рені.

При $\alpha = 1$, $\tau_a = 0$ отримуємо рівняння електродифузії із сталими коефіцієнтами взаємної дифузії без врахування просторової фрактальності в статистиці Рені

$$\frac{\partial}{\partial t} n_a(\vec{r};t) = {}_0D_t^{1-\xi} \sum_b \overline{D}_q^{ab} \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} \beta \nu_b^*(\vec{r};t), \tag{2.57}$$

При $\alpha = 1$, $\tau_a = 0$, $q = 1$, $\xi = 1$ ми отримуємо звичайні рівняння електродифузії для носіїв заряду у статистиці Гіббса.

$$\frac{\partial}{\partial t} n_a(\vec{r};t) = \sum_b \overline{D}^{ab} \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} \beta \nu_b(\vec{r};t). \tag{2.58}$$

Розглянемо ще одну модель для функції пам'яті:

$$W_a(\omega) = \frac{(i\omega)^{1-\xi}}{1 + (i\omega\tau_a)^{\gamma-1}}, 0 < \gamma < 1, 0 < \xi \leq 1, \tag{2.59}$$

тоді у частотному зображенні отримуємо:

$$\left(1 + (i\omega\tau_a)^{\gamma-1}\right) i\omega n_a(\vec{r};\omega) = (i\omega)^{1-\xi} \Psi_a(\vec{r};\omega). \tag{2.60}$$

З використанням (2.46), зворотне перетворення у рівнянні (2.60) до часової залежності, дає узагальнене рівняння електродифузії типу з врахуванням часової мультифрактальності та просторової фрактальності:

$$\tau_a^{\gamma-1} \frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} n_a(\vec{r};t) + \frac{\partial}{\partial t} n_a(\vec{r};t) = {}_0D_t^{1-\xi} \Psi_a(\vec{r};t) = \frac{\partial^{1-\xi}}{\partial t^{1-\xi}} \Psi_a(\vec{r};t) \tag{2.61}$$

подібні за структурою до рівнянь Кеттано роботи [209]. У випадку моделі для функції пам'яті:

$$W_a(\omega) = \frac{(i\omega)^{1-\xi}}{(i\omega\tau_a)^{\gamma-1}}, \tag{2.62}$$

отримуємо рівняння узагальненої електродифузії для носіїв заряду з просторово-часовою фрактальністю в статистиці Рені.

$$\tau_a^{\gamma-1} \frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} n_a(\vec{r};t) = {}_0D_t^{1-\xi} \Psi_a(\vec{r};t) = \frac{\partial^{1-\xi}}{\partial t^{1-\xi}} \Psi_a(\vec{r};t). \tag{2.63}$$

При $\xi = 1$ дане рівняння, матиме вигляд

$$\tau_a^{\gamma-1}\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma}n_a(\vec{r};t) = \Psi_a(\vec{r};t), \tag{2.64}$$

і у випадку нехтування просторовою залежністю коефіцієнтів взаємної дифузії, отримуємо

$$\tau_a^{\gamma-1}\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma}n_a(\vec{r};t) = \sum_b \overline{D}_q^{ab}\frac{\partial^{2\alpha}}{\partial \vec{r}^{2\alpha}}\beta\nu_b^*(\vec{r};t). \tag{2.65}$$

Розв'язки рівнянь типу (2.65) досліджувались у роботах [230, 231].

2.4 Висновки до розділу 2

На основі рівняння Ліувілля у дробових похідних, запропонованого Тарасовим [50,67,68,106] для класичної системи частинок з використанням методу нерівноважного статистичного оператора Зубарєва в статистиці Рені, отримано узагальнене (немарковське) рівняння дифузії у дробових похідних. На основі рівняння Ліувілля у дробових похідних, запропонованого Тарасовим [27,49,50] для класичної заряджених іонів з використанням методу нерівноважного статистичного оператора Зубарєва, отримано узагальнене (немарковське) рівняння електродифузії типу Кеттано у дробових похідних. Використано також принцип максимуму ентропії Рені. Отримано ряд рівнянь типу дифузії для відповідних значень параметрів фрактальності у просторі та часі.

Розділ 3

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СУБДИФУЗІЙНИХ ПРОЦЕСІВ В ЕЛЕКТРОЛІТИЧНІЙ СИСТЕМІ

У даному розділі подано результати математичного моделювання субдифузійного імпедансу в електролітичний системі для пояснення діаграм Найквіста експериментальних досліджень для системи $GaSe$ з інкапсульованим β-циклодекстрином. Моделювання здійснюється на основі субдифузійного рівняння Кеттано. Запропоновано мікроскопічну модель опису процесів переносу носіїв заряду в гібридних мультишарових наноструктурах. Основні результати опубліковані у [32, 33, 40, 43].

3.1 Експеримент і математичне моделювання

Сучасний етап розвитку фізики фотоелектродних, електродних процесів стимулює теоретичні дослідження та математичне моделювання реакційно-електродифузійних процесів в електролітичних системах. Дослідження кінетики фотокаталізу в напівпровідникових системах є важливим з точки глибшого розуміння процесів при акумулюванні сонячної енергії в електричну на сонячних батареях. Однією із важливих технологічних проблем у сучасних акумуляторних батареях є продовження життя і стійкості електродів (металічних, аморфних вуглецевих та ін.) у процесах експлуатації. У цьому напрямку проводяться електрохімічні імпендансні дослідження електродифузійних процесів переносу для літієвих батарей [4, 199–206].

Зокрема, у роботах [207, 208] були отримані діаграми Найквіста, побудо-

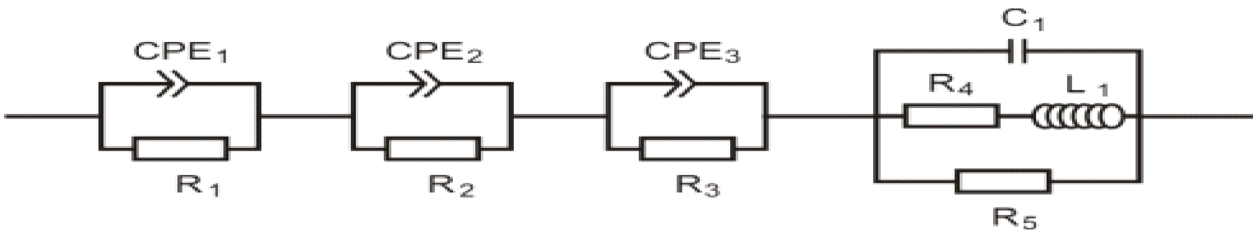


Рис. 3.1: Еквівалентна схема RC-ланки

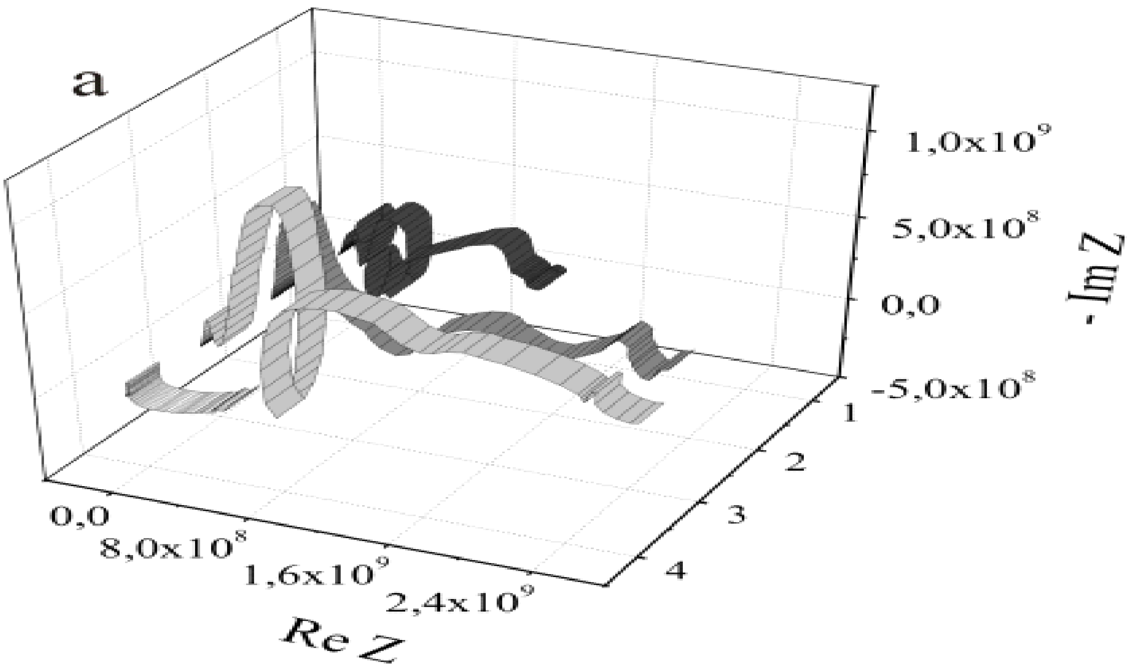


Рис. 3.2: Діаграми Найквіста, побудовані для напрямку, перпендикулярного до шарів розширеної матриці GaSe з інкапсульованим β–CD в кількості 6–(2), 10–(3) та 20–(4) мол% для температури 293 K в темряві (а). (1) — розширена кристалічна матриця.

вані для напрямку, перпендикулярного до шарів розширеної матриці GaSe з інкапсульованим β–циклодекстрином (CD) в кількості 6–(2), 10–(3) та 20–(4) мол% для температури 293 K в темряві (а), при освітленні (б) та у магнітному полі (в).

Аналізуючи побудовані годографи імпедансу (Рис. 3.2–3.4) слід звернути увагу на те, що для нерозширеного зразка селеніду галія діаграма Найквіста має вигляд півкола, який і відображає ємнісний відгук локалізованих станів. Після розширення (без β-циклодекстрину) вона трансформується до трьохдугового вигляду (Рис. 3.2), що вказує на формування енергетичного рельєфу

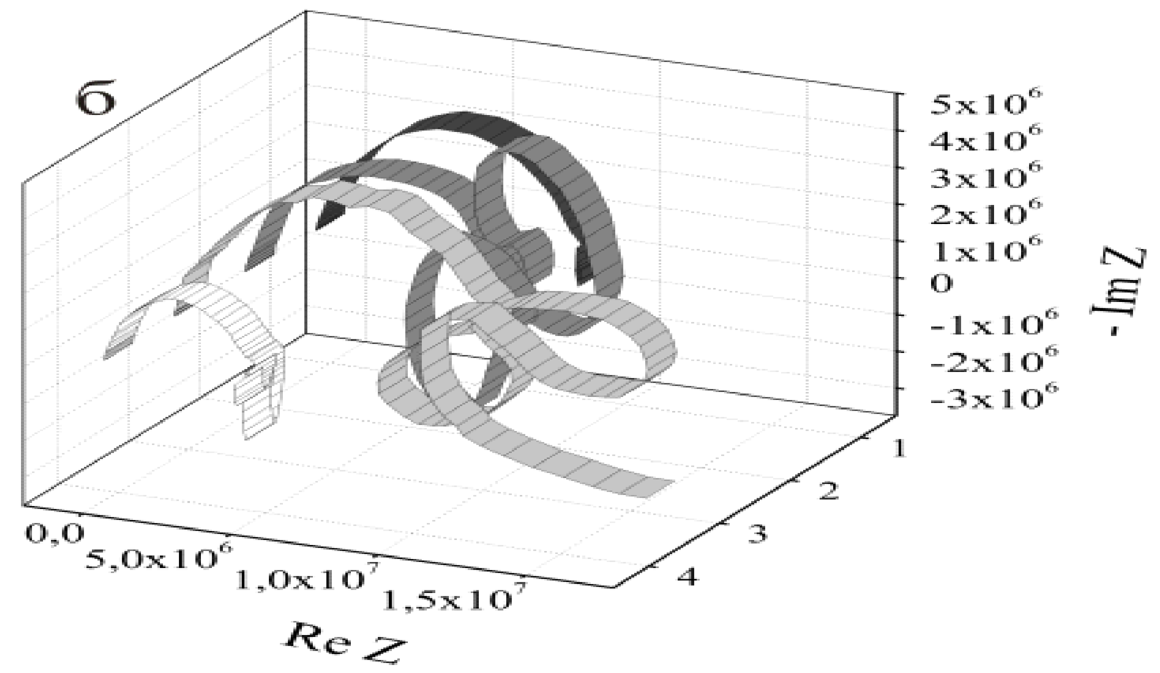


Рис. 3.3: Діаграми Найквіста, побудовані для напрямку, перпендикулярного до шарів розширеної матриці GaSe з інкапсульованим β–CD в кількості 6–(2), 10–(3) та 20–(4) мол% для температури 293 K при освітленні (б). (1) — розширена кристалічна матриця.

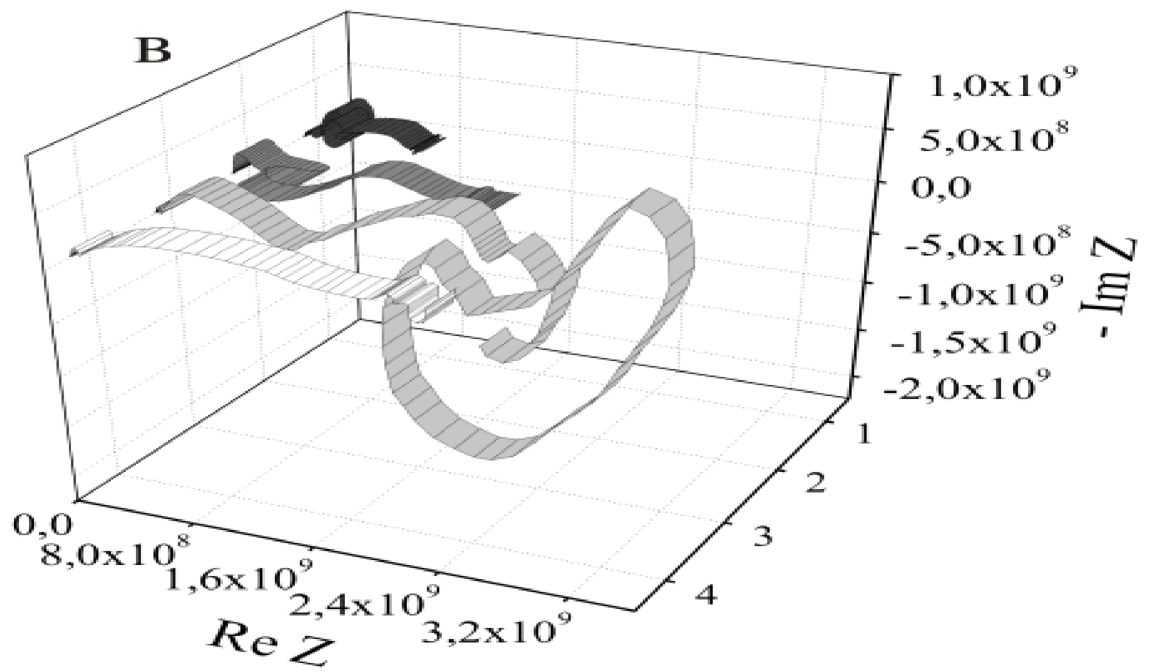


Рис. 3.4: Діаграми Найквіста, побудовані для напрямку, перпендикулярного до шарів розширеної матриці GaSe з інкапсульованим β–CD в кількості 6–(2), 10–(3) та 20–(4) мол% для температури 293 K магнітному полі (в). (1) — розширена кристалічна матриця.

для носіїв струму з трьома часами релаксації і наявною системою рівнів прилипання, які зумовлюють перехід середньочастотної вітки у IV ("індуктивний") квадрант площини комплексного імпедансу. Цьому відповідає трансформація еквівалентної електричної схеми від паралельної RC-ланки до вигляду, зображеному на Рис. 3.1. У ній елемент постійної фази CPE, імпеданс якого у комплексній площині виражається як [200]:

$$Z_{CPE} = K^{-1}(i\omega)^{-\gamma}, \tag{3.1}$$

де K — коефіцієнт пропорційності, γ — степеневий показник, що позначає фазове відхилення, відображає розподіленість ємності для кожного релаксаційного процесу. Після впровадження β-циклодекстрину частотний генезис діаграм Найквіста суттєво ускладнюється відображенням енергетичних бар'єрів для струмопроходження через прошарки β-циклодекстрину та міжфазну межу матриця || кавітандний контент. Дані дослідження свідчать про особливість фракталізованої гостьової системи. При цьому, виходячи з практичної мети — застосування їх для високодобротних конденсаторів радіочастотного діапазону для аналізу бралися до уваги дані, яким відповідають значення тангенса $\operatorname{tg}\delta$ кута електричних втрат менші від одиниці. Цій умові відповідає частотний інтервал ($1 \div 10^6$ Гц). Насамперед, зазначимо, що перше впровадження β-циклодекстрину в основному міняє тільки частотну дисперсію $tg\delta$ розширеної матриці, у той час як збільшення вмісту органічного контенту до 10 мол.% викликає його зменшення уздовж усієї дослідженої ω-осі. Вміст β-циклодекстрину 20 мол.% реверсує цю зміну, напевно через ріст концентрації носіїв струму. Діелектрична проникність вздовж кристалографічної осі найсуттєвіше міняється після досягнення вмісту β-циклодекстрину 10 мол.%. У цьому випадку у високочастотній області $\varepsilon(\omega)$ набуває яскраво вираженого осциляційного характеру, демонструючи аномальну частотну дисперсію - ріст діелектричної проникності зі збільшенням частоти. Вона може бути зумовлена появою додаткової поляризації при перескоковому перенесенні заряду по локалізованих станах поблизу рівня Фермі. Частотна поведінка імпедансу (3.1) та діелектричної проникності [207, 208] вказують на складний нелінійний, осциляційний характер процесів переносу заряду у такій системі. Поведінка (3.1) свідчить про аномальність імпедансних процесів. Дослідження їх як з експериментальної, так і теоретичної точки зору є актуальними. До аномальних явищ в електролітичних процесах відноситься субдифузія.

Для математичного моделювання даних процесів ми застосували рівняння субдифузії з дробовою похідною за часом Рімана-Ліувілля. В загальному, процеси субдифузії відбуваються у системах, де руху частинок значно перешкоджає внутрішня структура середовища, наприклад як в пористому середовищі, гелі, аморфних напівпровідниках та ін. [3–5, 52–55, 84, 209–215]. Субдифузія характеризується часовою залежністю середнього квадрату зміщення частинки:

$$\langle \Delta x^2 \rangle = 2D_\alpha t^\alpha / \Gamma(1+\alpha),$$

де D_α — субдифузійний коефіцієнт, виміряний в одиницях m^2/c^α і α — параметр субдифузії зі значенням в діапазоні $0 < \alpha < 1$. Для $\alpha = 1$ маємо звичайну дифузією. Теоретичний аналіз субдифузійного імпедансу був поданий у роботі [4] з використанням рівнянь субдифузії з дробовою похідною за часом Рімана-Ліувілля. У роботі [5] для опису субдифузійних процесів було запропоновано рівняння Кеттано [209]:

$$\tau \frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial t^2} + \frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = D_\alpha \frac{\partial^{1-\alpha}}{\partial t^{1-\alpha}} \frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2}, \tag{3.2}$$

у якому параметри D_α і τ (час, на який потік затримується відносно градієнту концентрації $c(x,t)$) розглядаються як незалежні один від одного. На основі рівняння (3.2), будемо досліджувати частотну залежність імпедансу наноструктурної системи $Z(i\omega)$, який знаходимо з співвідношення:

$$Z(i\omega) = R_W \frac{\hat{c}(0, i\omega)}{\hat{j}(0, i\omega)},$$

де R_W — опір Варбурга, $\hat{j}(0, i\omega)$ — потік заряду, ω — частота. Далі будемо припускати, що процес переносу зарядів у системі описується узагальненим рівнянням Кеттано (3.2) з наступними початковими і граничними умовами (на границі L) [5]:

$$c(x,0) = \frac{\partial}{\partial t} c(x,t)_{|t=0} = 0,$$

$$a_j j(L, t+\tau) + b_L c(L, t) = 0.$$

В результаті, на основі розв'язків рівняння Кеттано були розраховані діаграми Найквіста із зміною частоти у діапазоні $\omega \in (10^{-1}, 10^5)$, при $R_W = 1$, $L = 1$, результати, яких подані на Рис. 3.5–3.10.

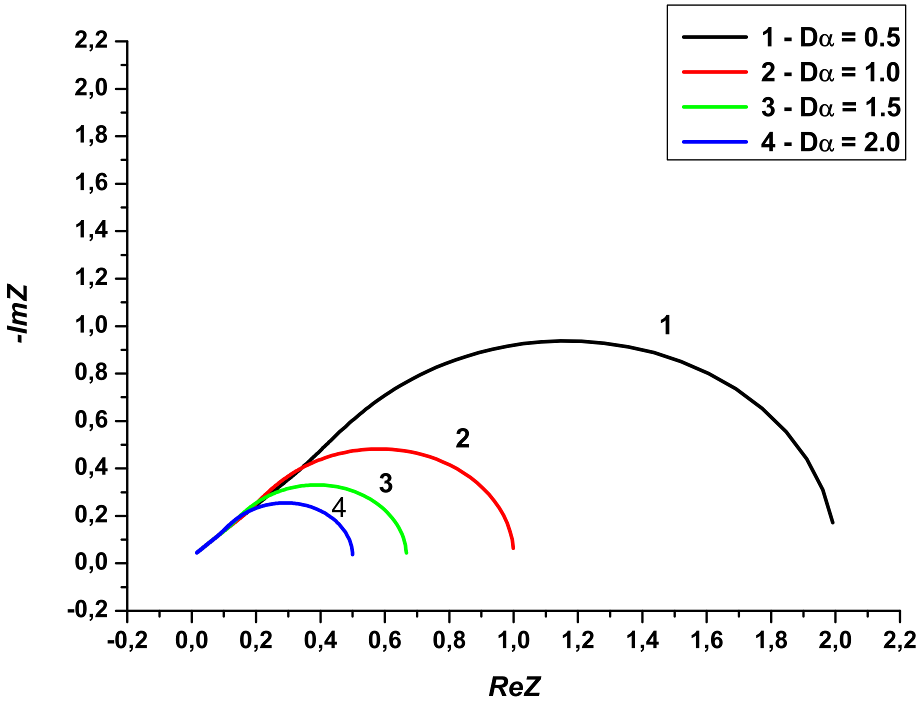


Рис. 3.5: Діаграма Найквіста для $\tau = 0$

На Рис. 3.5–3.8 подані результати досліджень частотної залежності імпедансу при заданих значеннях параметра τ із зміною субдифузійного коефіцієнта дифузії при $\alpha = 1$. При $\tau = 0$ ми маємо стандартну діаграму Найквіста, при зростанні значення часу, на який потік затримується відносно градієнту концентрації характер діаграм Найквіста із зміною коефіцієнта дифузії суттєво змінюється і набирає осциляційного характеру. Очевидно, що як і зміна коефіцієнта дифузії, так потоку залежать від зміни механізмів переносу електронів, зміни структури системи, впливу магнітного, чи електромагнітного поля у певному напрямку. На Рис. 3.9 і 3.10 подані діаграми Найквіста, коли значення коефіцієнтів дифузії фіксовані, а змінюється час, на який потік затримується відносно градієнту концентрації. Як бачимо, при $\tau = 0$ і $\tau = 0.01$ маємо дифузійний Варбург, при $\tau = 0.09$ і $\tau = 0.1$ різко змінюється характер

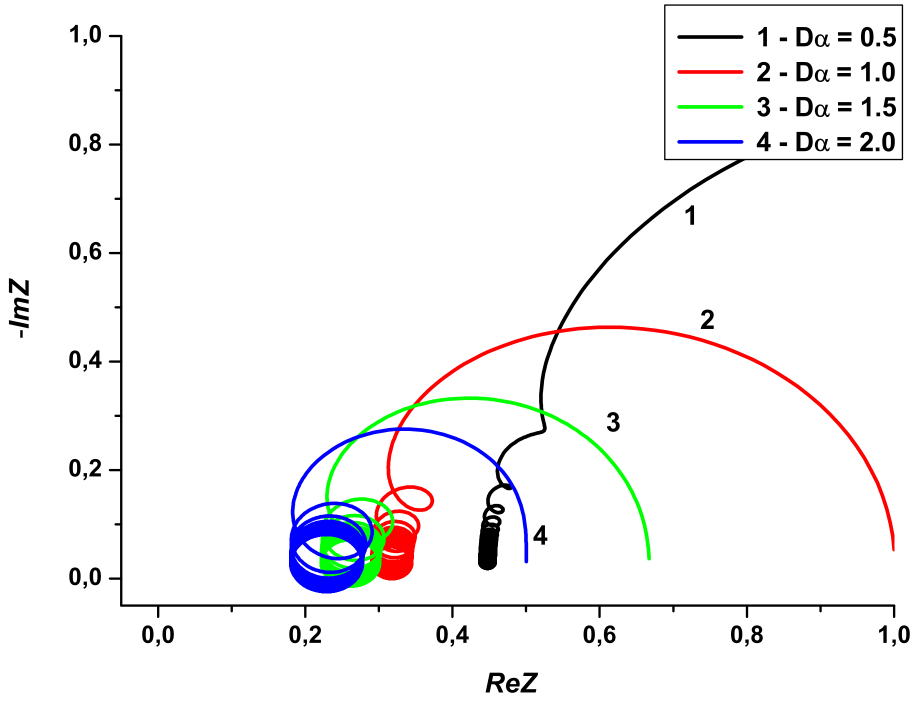


Рис. 3.6: Діаграма Найквіста для $\tau = 0.1$

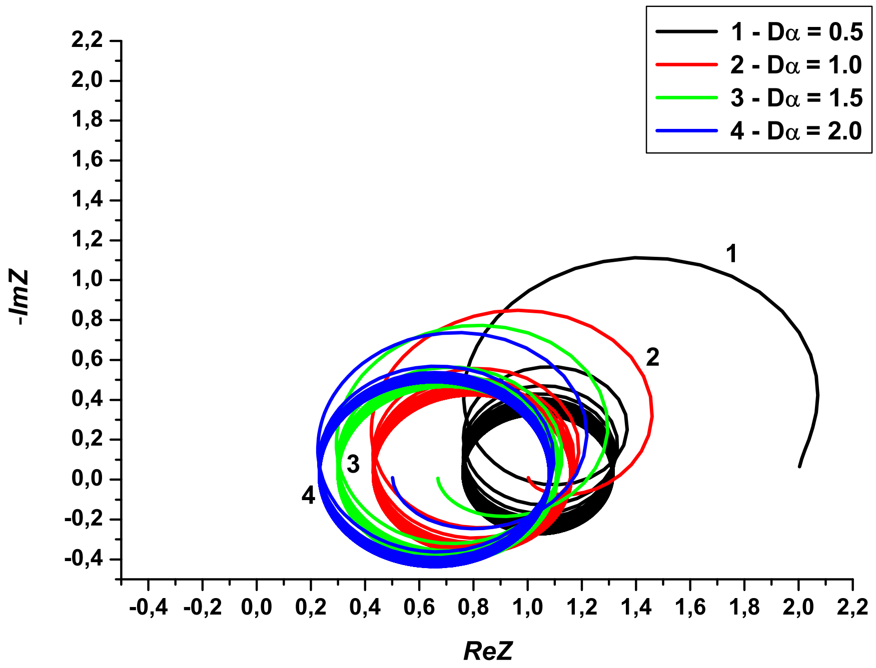


Рис. 3.7: Діаграма Найквіста для $\tau = 0.5$

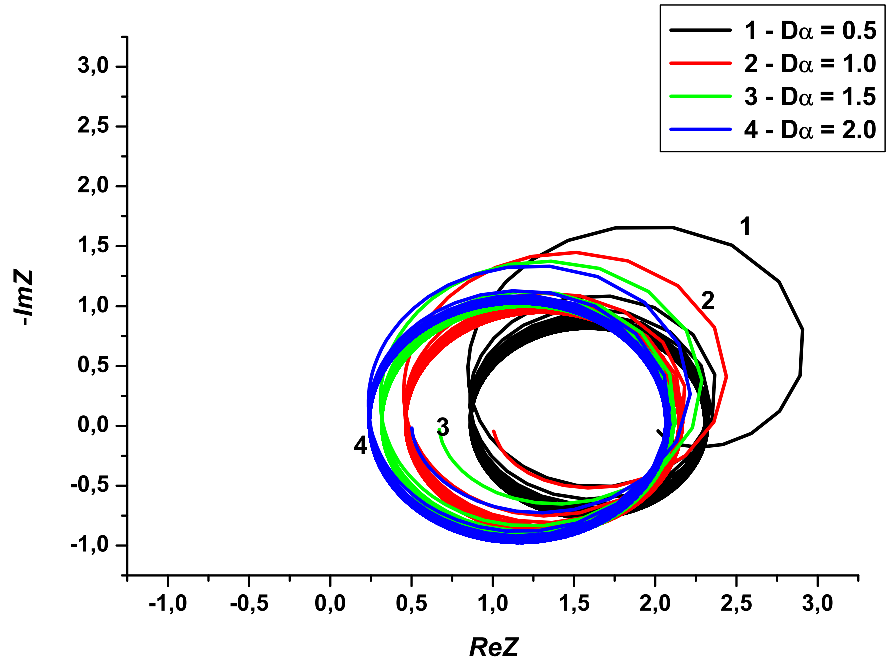


Рис. 3.8: Діаграма Найквіста для $\tau = 1.0$

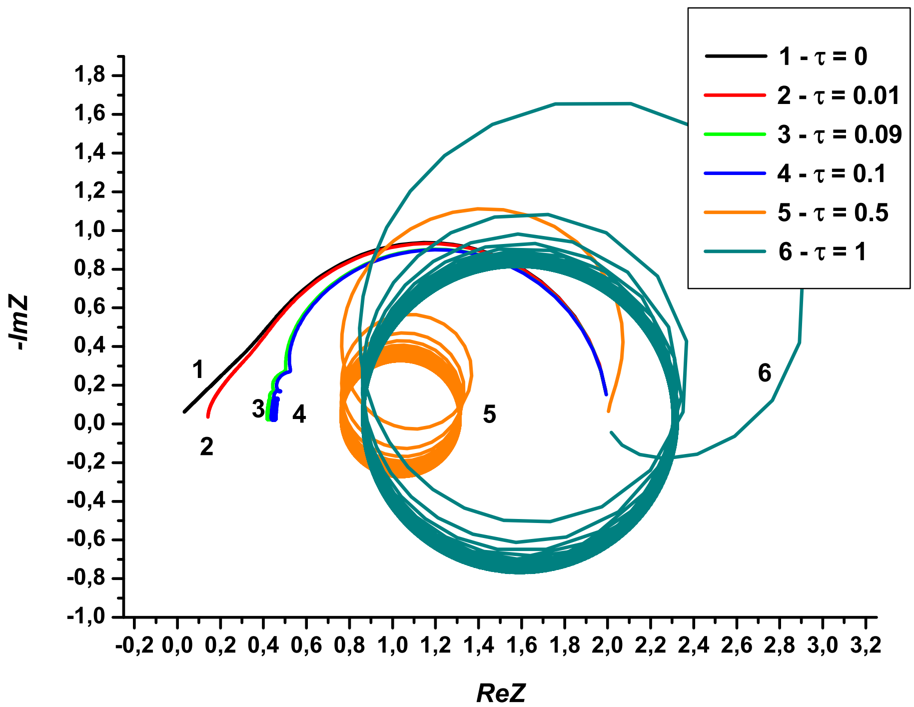


Рис. 3.9: Діаграма Найквіста для $D_\alpha = 0.5$

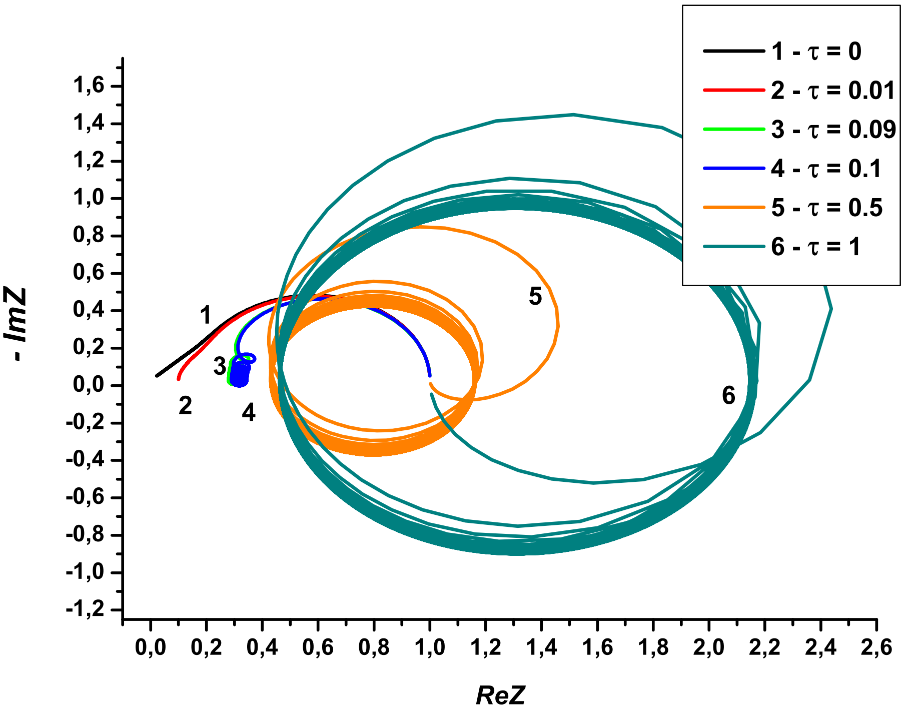


Рис. 3.10: Діаграма Найквіста для $D_\alpha = 1$

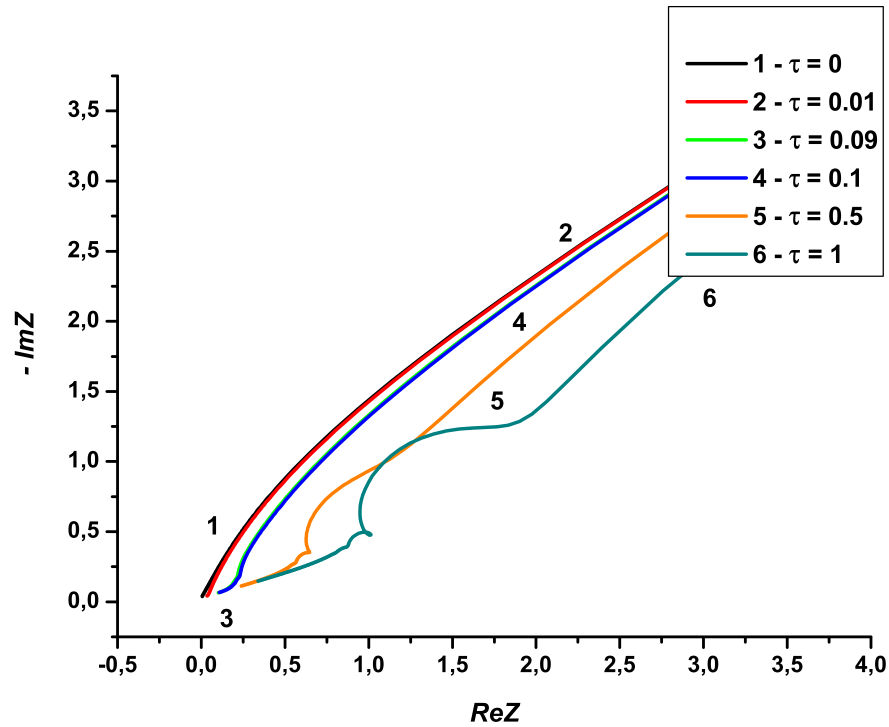


Рис. 3.11: Діаграма Найквіста для $D_\alpha = 0.5$, $\alpha = 0.6$

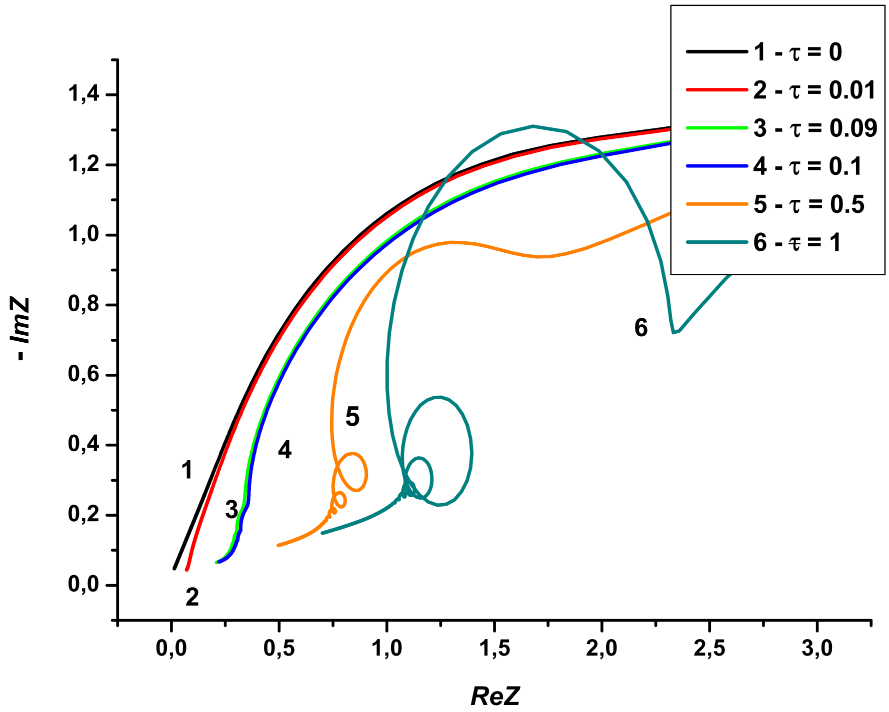


Рис. 3.12: Діаграма Найквіста для $D_\alpha = 0.5$, $\alpha = 0.8$

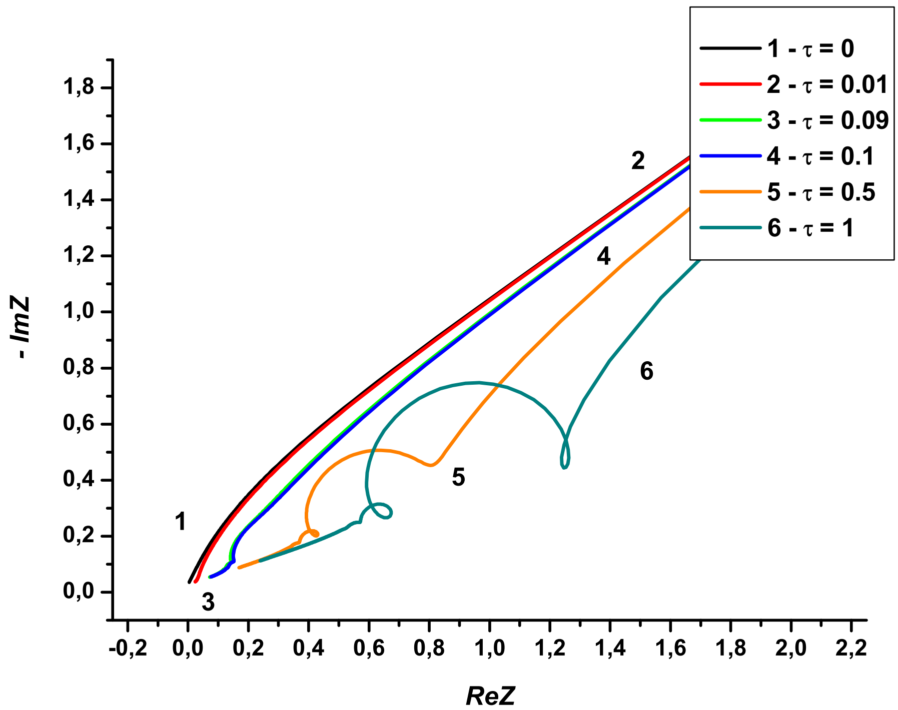


Рис. 3.13: Діаграма Найквіста для $D_\alpha = 1$, $\alpha = 0.6$

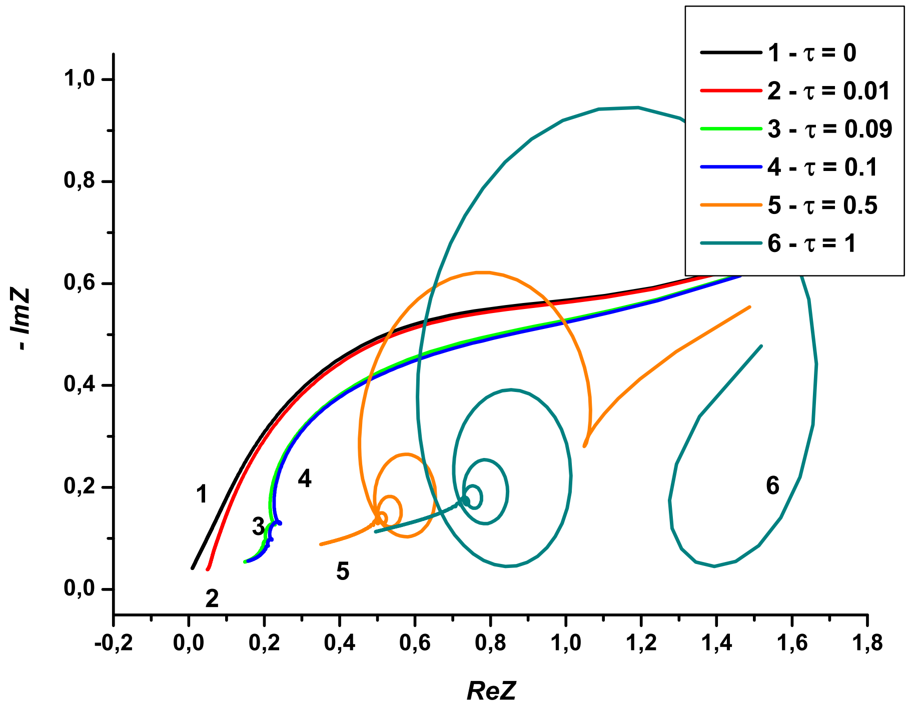
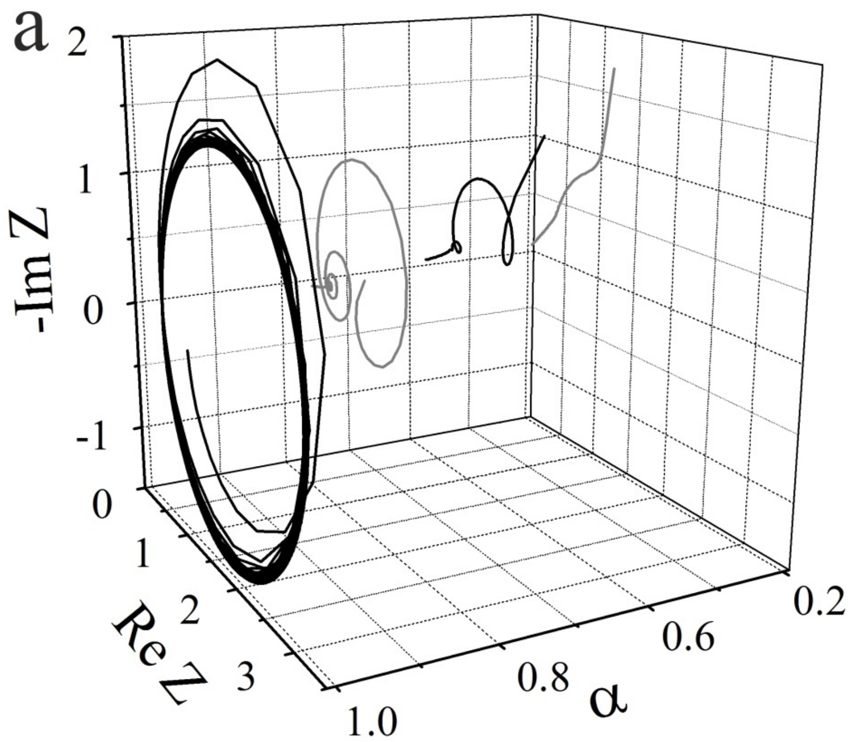


Рис. 3.14: Діаграма Найквіста для $D_\alpha = 1$, $\alpha = 0.8$

частотної залежності імпедансу і далі при $\tau = 0.5$ і $\tau = 1$ набирає коливного характеру. У роботі [5] було показано, що параметр τ впливає на процес переносу менше (труднощі у русі зарядів збільшуються), коли α мале. Ми провели розрахунки діаграм Найквіста коли $\alpha = 0.6$ і $\alpha = 0.8$ при відповідних значеннях субдифузійного коефіцієнта $D_\alpha = 0.5$ і $D_\alpha = 1$ із зміною часу τ. Результати розрахунків подані на Рис.3.11-3.14. Як бачимо, поведінка діаграм Найквіста при зміні α і τ суттєво змінюється при фіксованих значеннях коефіцієнта субдифузії. Ми спостерігаємо певну стадійність процесів переносу носіїв заряду (електронів, дірок).

З аналізу діаграм Найквіста Рис.3.15 випливає, що ріст τ закономірно викликає ріст як дійсної, так і уявної складових імпедансу (зауважимо, що годографи імпедансу для $\tau = 1.5 \div 5$ практично не залежать від значення субдифузійного коефіцієнта з інтервалу $D_\alpha = 0.5 \div 1$); при $\alpha \neq 1$ функція $ImZ(\alpha)$ має мінімум, а індуктивний відгук більш яскраво виражений при вищих значення τ при однакових значеннях α з інтервалу $0.6 < \alpha \leq 0.8$; частотна дисперсія $Z(i\omega)$ зростає тільки зі збільшенням α, незалежно τ; низькі значення параметра субдифузії (наприклад, $\alpha \leq 0.2$) вказують на суттєві затруднення в



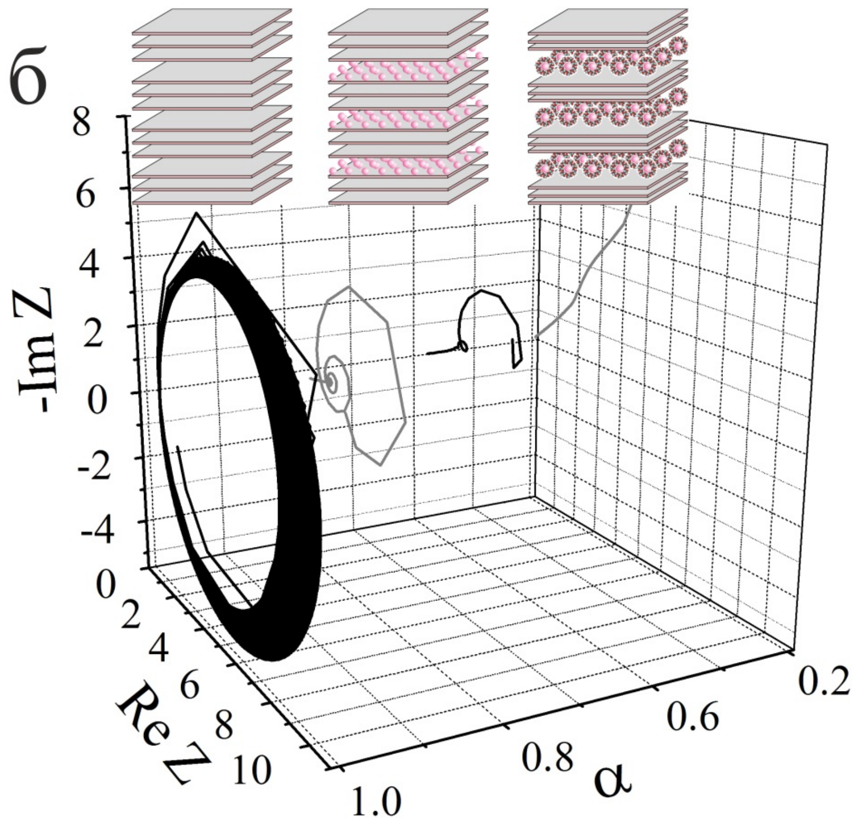


Рис. 3.15: Діаграми Найквіста, розраховані на основі розв'язків рівняння Кеттано для різних значень параметрів субдифузії α при часі затримки τ 1.5 (а) та 5(б)

процесах перенесення заряду і, як наслідок - накопичення просторового заряду. Аналіз наведених діаграм Найквіста приводить до дещо неочікуваного результату: спостережуваний на експерименті [37] ріст частотної дисперсії годографа імпедансу при синтезі в електричному полі з одночасним освітленням зумовлений не, як очікувалося, ростом τ, а зміною часової фрактальної розмірності α. Це стосується і появи індуктивного відгуку у високочастотній області. Ріст частотної дисперсії $Z(i\omega)$ при освітленні, яке передбачає фотоіндуковану поляризацію у таких системах, також корелює насамперед зі зміною α.

Для вияснення такої поведінки параметрів τ, α та D_α і вплив їх на імпедансні залежності необхідний розвиток мікроскопічної теорії процесів переносу, яка б враховувала характер взаємодії електронів у мультишарових наноструктурах при дії зовнішніх полів (магнітного, електромагнітного).

3.2 Мікроскопічна модель

Будемо розглядати модель гібридної мультишарової наноструктури, гамільтоніан якої має вигляд

$$H(t) = H_e + H_{e-ph} + H_{e-m} + H_{m-ph} + H_{m-m} + H_{ph}, \tag{3.3}$$

де

$$H_e(t) = \frac{\hbar^2}{2m_e}\sum_{j=1}^{N_e}\left(\boldsymbol{\nabla}_j - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}_j;t)\right)^2 + V_{ee} + \sum_{j=1}^{N_e} e\Phi(\mathbf{r}_j;t)$$

— гамільтоніан електронної підсистеми, V_{ee} — потенціал ефективної електрон-електронної взаємодії та H_{e-ph} — гамільтоніан електрон-фононної взаємодії у наноструктурі. $\mathbf{A}(\mathbf{r}_j;t)$,$\Phi(\mathbf{r}_j;t)$ векторний та скалярний потенціали електромагнітного поля, що діють на електрони у наноструктурі. H_{e-m} — гамільтоніан взаємодії електронів та поляризованих макромолекул (зокрема, β-циклодекстрину), інтеркальованих між шарами наноструктури, H_{m-ph} — гамільтоніан взаємодії поляризованих макромолекул у шарах із структурою матриці, H_{m-m} — гамільтоніан взаємодії поляризованих макромолекул у шарах та між шарами, H_{ph} — гамільтоніан фонон-фононної взаємодії матриці.

Нерівноважний стан такої системи може бути описаний скороченим набором спостережуваних величин:

$$n_e(\mathbf{r}, t) = \langle \hat{n}_e(\mathbf{r}) \rangle^t, \tag{3.4}$$

— нерівноважне середнє значення густини електронів в наноструктурі,

$$n_m(\mathbf{f}, \Omega, t) = \langle \hat{n}_m(\mathbf{f}, \Omega) \rangle^t \tag{3.5}$$

— нерівноважні середні значення поляризованих макромолекул інтеркальованих у шари матриці, локалізованих у центрах $\mathbf{f}$ із орієнтаціями Ω, де квантові оператори густини електронів $\hat{n}_e(\mathbf{r}) = \hat{\Psi}_e^+(\mathbf{r})\hat{\Psi}_e(\mathbf{r})$, побудовані на операторах народження $\hat{\Psi}_e^+(\mathbf{r}_s)$ та знищення $\hat{\Psi}_e(\mathbf{r}_s)$ електронів у наноструктурі. $\hat{n}_m(\mathbf{r}_f, \Omega)$ — мікроскопічна густина поляризованих макромолекул у шарах матриці.

У (3.4), (3.5) нерівноважні середні значення $\langle \ldots \rangle^t = \mathrm{Sp} \ldots \rho(t)$, розраховуються за допомогою $\rho(t)$ — нерівноважного статистичного оператора частинок шаруватої нанаструктури. Для його знаходження будемо застосовувати нерівноважний статистичний оператор [25, 147, 148, 159], у якому нерівноважний статистичний оператор системи отримується як розв'язок рівняння Ліувілля. В загальному, розв'язок рівняння Ліувілля з врахуванням проектування можна подати у вигляді:

$$\rho(t) = \rho_{rel}(t) - \int_{-\infty}^{t} \mathrm{e}^{\varepsilon(t'-t)} T(t, t')(1 - P_{rel}(t')) iL(t') \rho_{rel}(t') \mathrm{d}t', \tag{3.6}$$

де $iL(t')$ — оператор Ліувілля, що відповідає гамільтоніану задачі (3.3),

$$T(t, t') = \exp\left(-\int_{t'}^{t} (1 - P_{rel}(t''))\, iL(t') \mathrm{d}t'' \right) \tag{3.7}$$

— узагальнений оператор еволюції з проектуванням Кавасакі-Гантона $P_{rel}(t')$, структура якого залежить від параметрів скороченого опису та релевантного статистичного оператора $\rho_{rel}(t)$. Оскільки, процеси переносу у розглядуваних наноструктурах, як показують експериментальні дослідження та математичне моделювання на основі субдифузійного рівняння Кеттано є нелінійними з аномальними концетраційно-потоковими кореляціями, тому опис нерівноважних процесів сформулюємо на основі методу нерівноважного статистичного оператора в статистиці Рені [26]. У такому підході $\rho_{rel}(t)$ знаходиться із екстремуму інформаційної ентропії Рені при фіксованих значеннях спостережуваних змінних (у нашому випадку фіксовані (3.4), (3.5) та збережені умови нормування $\mathrm{Sp}\rho_{rel}(t)=1$,

$$\rho_{rel}(t)=Z_R^{-1}(t)\Bigg\{1-\frac{q-1}{q}\beta(t)\Bigg(\Delta H(t)-\int d\mathbf{r}(\mu_e(\mathbf{r};t)- \tag{3.8}$$

$$-e\Phi(\mathbf{r};t))\Delta\hat{n}_e(\mathbf{r};t)-\sum_{\mathbf{f}}\int d\Omega\nu_m(\mathbf{f},\Omega;t)\Delta\hat{n}_m(\mathbf{r}_f,\Omega);t\Bigg)\Bigg\}^{\frac{1}{q-1}},$$

де

$$Z_R(t)=\mathrm{Sp}\Bigg\{1-\frac{q-1}{q}\beta(t)(\Delta H(t)-\int d\mathbf{r}(\mu_e(\mathbf{r};t)-e\Phi(\mathbf{r};t))\Delta\hat{n}_e(\mathbf{r};t)- \tag{3.9}$$

$$-\sum_{\mathbf{f}}\int d\Omega\nu_m(\mathbf{f},\Omega;t)\Delta\hat{n}_m(\mathbf{f},\Omega);t)\Bigg\}^{\frac{1}{q-1}}$$

— статистична сума релевантного статистичного оператора, $0<q\leqslant 1$ — параметр Рені,

$$\Delta H(t)=H(t)-\langle H(t)\rangle_{rel}^t,$$

$$\Delta\hat{n}_e(\mathbf{r};t)=\hat{n}_e(\mathbf{r})-\langle\hat{n}_e(\mathbf{r})\rangle_{rel}^t,$$

$\Delta\hat{n}_m(\mathbf{r}_f,\Omega);t)=\hat{n}_m(\mathbf{f},\Omega)-\langle\hat{n}_m(\mathbf{f},\Omega)\rangle_{rel}^t$ — флуктуації параметрів скороченого опису, $\mu_e(\mathbf{r};t)$ і $\Phi(\mathbf{r};t)$ — хімічний потенціал електронів та електричний потенціал електромагнітного поля, $\nu_m(\mathbf{f},\Omega;t)=\mu_m(\mathbf{f},\Omega;t)+\mathbf{d}_m{\cdot}\mathbf{E}(\mathbf{f};t)$ — дипольно-хімічний потенціал макромолекул інтеркальованих в шари наноструктури (у випадку коли молекули володіють дипольним моментом), $\mu_m(\mathbf{f},\Omega;t)$ — хімічний потенціал макромолекули, $\mathbf{E}(\mathbf{f};t)$ — електричне поле, яке створюється електричним потенціалом зарядів системи. $\mathbf{d}_m$ — вектор дипольного моменту макромолекули. Важливо зазначити, що релевантний статистичний оператор (3.8) має степеневу залежність від параметрів скороченого опису і, коли $q = 1$ він переходить у релевантний статистичний оператор статистики Гіббса. За допомогою нерівноважного статистичного оператора (3.6) та структури релевантного статистичного оператора (3.8) отримаємо систему рівнянь переносу для параметрів скороченого опису:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\Delta\hat{n}_e(\mathbf{r})\rangle^t = \langle iL(t)\Delta\hat{n}_e(\mathbf{r})\rangle^t_{rel} - \tag{3.10}$$

$$-\int d\mathbf{r}'\int\limits_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\varphi_{ee}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')(\mu_e(\mathbf{r}';t') - e\Phi(\mathbf{r}';t'))dt' -$$

$$-\sum_{\mathbf{f}'}\int d\Omega'\int\limits_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\varphi_{em}(\mathbf{r},\mathbf{f}'\Omega',;t,t')\left(\mu_m(\mathbf{f}',\Omega';t') + \mathbf{d}_m\cdot\mathbf{E}(\mathbf{f}';t')\right)dt',$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\Delta\hat{n}_m(\mathbf{f},\Omega)\rangle^t = \langle iL(t)\hat{n}_m(\mathbf{f},\Omega)\rangle^t_{rel} - \tag{3.11}$$

$$-\int d\mathbf{r}'\int\limits_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\varphi_{me}(\mathbf{f},\Omega,\mathbf{r}';t,t')(\mu_e(\mathbf{r}';t') - e\Phi(\mathbf{r}';t'))dt' -$$

$$-\sum_{\mathbf{f}'}\int d\Omega'\int\limits_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\varphi_{mm}(\mathbf{f},\Omega,\mathbf{f}'\Omega',;t,t')(\mu_m(\mathbf{f}',\Omega';t') + \mathbf{d}_m\cdot\mathbf{E}(\mathbf{f}';t'))dt',$$

де ядра переносу мають наступну структуру:

$$\varphi_{ab}(t,t') = \tag{3.12}$$

$$= \frac{1}{q}\left\langle(1 - P(t))iL(t)\hat{n}_a T(t,t')\int\limits_0^1 d\tau\rho^{\tau}_{rel}(t')(1 - P(t'))iL(t')\hat{n}_b\rho^{-\tau}_{rel}(t')\right\rangle^{t'}_{rel},$$

де $P(t')$ – проекційний оператор Морі, що відповідає структурі $\rho_{rel}(t)$ і має складну структуру [160], однак, коли параметр Рені $q = 1$, він перетворюється в узагальнений проекційний оператор Морі статистики Гіббса і побудований на операторах $\hat{n}_e(\mathbf{r})$, $\hat{n}_m(\mathbf{f},\Omega)$. Процедура усереднення у ядрах переносу виконується із релевантним статистичним оператором (3.8), який є степеневою функцією за параметрами скороченого опису. Узагальнені ядра переносу пов'язані із узагальненими коефіцієнтами дифузії електронів та макромолекул у наноструктурі. При чому, при $q = 1$ коефіцієнти дифузії будуть відповідати статистиці Гіббса, тобто будуть нормальними коефіцієнтами дифузії - закону Фіка. Узагальнені рівняння переносу (3.10), (3.11) описують нефіковські дифузійні процеси. Важливим наступним завданням є встановлення зв'язку між параметрами τ, α та D_α моделі (3.2) із узагальненими ядрами переносу рівнянь (3.10), (3.11), що дасть можливість з'ясувати механізми такої поведінки діаграм Найквіста. Це широкий спектр досліджень, оскільки вимагає конкретизації структури кожного доданку гамільтоніану (3.3) для конкретних систем.

Таким чином, ми розглянули модель субдифузійного імпедансу на основі рівняння Каттано у дробових похідних у застосуванні до мультишарових наноструктур. Розраховані діаграми Найквіста із зміною параметра τ, α та D_α свідчать про складні процеси переносу, що відбуваються у системі і характерні для експериментальних даних Рис. 3.2–3.4. Запропонували мікроскопічну модель, яка приводить до узагальнених рівнянь переносу, що описують нефіковські дифузійні процеси (в рамках статистики Рені) для носіїв заряду у мультишарових наноструктурах. Мультишарові наностркутри мають фрактальну структуру. З точки зору математичного моделювання процесів іонної інтеркаляції у такі структури важливим питанням є врахування фрактальності у рівняннях переносу заряду.

3.3 Висновки до розділу 3

Розглянуто модель субдифузійного імпедансу на основі рівняння Каттано у дробових похідних у застосуванні до мультишарових наноструктур. Розраховано діаграми Найквіста із зміною параметра τ, α та D_α, які свідчать про складні процеси переносу, що відбуваються у системі і характерні для експериментальних даних Рис. 3.2–3.4.

Запропоновано мікроскопічну модель, яка приводить до узагальнених рівнянь переносу, що описують нефіковські дифузійні процеси (в рамках статистики Рені) для носіїв заряду у мультишарових наноструктурах.

Розділ 4

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ КОЕФІЦІЄНТІВ q-ДИФУЗІЇ

У даному розділі розглядається один із шляхів отримання узагальненого (немарковського) рівняння дифузії з використанням методу НСО Зубарєва [25, 26, 148, 159] та принципу максимуму ентропії Рені, який базується на степеневих розподілах. Такі підходи важливі з точки зору математичного моделювання дифузійних процесів у випадкових та регулярних структурах [16, 232]. Проводиться чисельний розрахунок узагальненого коефіцієнта дифузії та функції розсіювання для модельної системи частинок.

Результати представлені у розділі базуються на матеріалі трьох статтях [31, 34, 35] і двох тезах [41, 42].

4.1 Нерівноважна функція розподілу частинок у дифузійних процесах

Для опису та математичного моделювання дифузійних процесів у класичних газах та рідинах з модельним гамільтоніаном

$$H = \sum_{j=1}^{N} \frac{p_j^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{j\neq l}^{N} \Phi\left(|\vec{r}_{jl}|\right) \tag{4.1}$$

основним параметром скороченого опису є нерівноважна густина числа частинок $n(\vec{r};t) = \langle \hat{n}(\vec{r}) \rangle^t$, де $n(\vec{r}) = \sum\limits_{j=1}^{N} \delta(\vec{r}-\vec{r}_j)$ —мікроскопічна густина числа частинок; $\vec{r}_j$, $\vec{p}_j$ — вектори координати та імпульсу j-ої частинки, $\Phi\left(|\vec{r}_{jl}|\right)$ —

модельний парний потенціал взаємодії частинок на відстані $|\vec{r}_{jl}|$ у середовищі. Нерівноважні середні $\int d\Gamma_N \hat{n}(\vec{r})\rho\left(x^N;t\right) = \langle\hat{n}(\vec{r})\rangle^t$ розраховуються з $\rho\left(x^N;t\right)$ — нерівноважного статистичного оператора (функцією розподілу) системи, що задовольняє рівняння Ліувілля (1.18) з оператором Ліувілля (1.21). У методі НСО [25,148,159], коли вибрані основні параметри скороченого опису, $\rho\left(x^N;t\right)$ може бути поданий (як розв'язок рівняння Ліувілля) у загальній формі з врахуванням проектування (1.20).

Для опису дифузійних процесів $\rho_{rel}\left(x^N;t'\right)$ будемо шукати на основі підходу [26] із екстремуму функціоналу ентропії Рені при фіксованих значеннях $n(\vec{r};t) = \langle\hat{n}(\vec{r})\rangle^t$ і збережені умови нормування

$$\int d\Gamma_N \rho_{rel}\left(x^N;t'\right) = 1,$$

в результаті отримаємо:

$$\rho_{rel}(x^N;t) = \frac{1}{Z_R(t)}\left(1 - \frac{q-1}{q}\left(\beta\left(H - \int d\vec{r}\mu(\vec{r};t)\delta\hat{n}(\vec{r};t)\right)\right)\right)^{\frac{1}{q-1}}, \quad (4.2)$$

де

$$Z_R(t) = \int d\Gamma_N\left(1 - \frac{q-1}{q}\left(\beta\left(H - \int d\vec{r}\mu(\vec{r};t)\delta\hat{n}(\vec{r};t)\right)\right)\right)^{\frac{1}{q-1}} \quad (4.3)$$

— статистична сума релевантної функції розподілу, де $\beta = \dfrac{1}{k_Б T}$, $k_Б$ — константа Больцмана, T — рівноважна температура, $\delta\hat{n}(\vec{r};t) = \hat{n}(\vec{r}) - \langle\hat{n}(\vec{r})\rangle^t$ — флуктуації густини, а параметр $\mu(\vec{r};t)$ визначається із умови самоузгодження:

$$\langle\hat{n}(\vec{r})\rangle^t = \langle\hat{n}(\vec{r})\rangle^t_{rel}, \quad (4.4)$$

і є просторово-часово залежним хімічним потенціалом частинок. Важливо зазначити, що при $q = 1$ релевантна функція розподілу (4.2) в статистиці Рені переходить у розподіл статистики Гіббса [159]. Розподіл (4.2) можна подати у вигляді:

$$\rho_{rel}(x^N;t) = \frac{1}{Z_R(t)}\left(1 - \frac{q-1}{q}\beta\left(H - \int d\vec{r}\mu^*(\vec{r};t)\hat{n}(\vec{r})\right)\right)^{\frac{1}{q-1}}, \quad (4.5)$$

де

$$Z_R(t) = \int d\Gamma_N \left(1 - \frac{q-1}{q}\beta\left(H - \int d\vec{r}\mu^*(\vec{r};t)\hat{n}(\vec{r})\right)\right)^{\frac{1}{q-1}},$$

$$\mu^*(\vec{r};t) = \frac{\mu(\vec{r};t)}{1 + \frac{q-1}{q}\int d\vec{r}\mu(\vec{r};t)\left\langle \hat{n}(\vec{r})\right\rangle^t}.$$

Підставивши (4.5) у (4.2), для нерівноважного статистичного оператора отримаємо:

$$\begin{aligned} &\rho(x^N;t) = \\ &= \rho_{rel}(x^N;t) + \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}T(t,t')\int d\vec{r}' I_n(\vec{r}';t')\rho_{rel}(t)\mu^*(\vec{r}';t)dt', \end{aligned} \tag{4.6}$$

де

$$I_n(\vec{r};t) = (1 - P(t))\,\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)iL_N\hat{n}(\vec{r}) \tag{4.7}$$

— узагальнений потік, у якому функція $\psi(t)$ рівна

$$\psi(t) = 1 - \frac{q-1}{q}\beta\left(H - \int d\vec{r}\mu^*(\vec{r};t)\hat{n}(\vec{r})\right).$$

$P(t)$ — проекційний оператор, що має наступну структуру:

$$\begin{aligned} P(t)\ldots &= \int d\vec{r}\int d\vec{r}'\,\langle\ldots\hat{n}(\vec{r})\rangle_{rel}^t\left[\left\langle\hat{n}(\vec{r})\delta\left\{[q\psi(t)]^{-1}\hat{n}(\vec{r}')\right\}\right\rangle_{rel}^t\right]^{-1}\times \\ &\times\ \delta\left\{[q\psi(t)]^{-1}\,\hat{n}(\vec{r}')\right\}, \end{aligned}$$

де $\delta\{A\} = A - \langle A\rangle_{rel}^t$.

4.2 Узагальнене рівняння q-дифузії

За допомогою НСО (4.6) для параметра скороченого опису отримується узагальнене рівняння дифузії [31]:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{n}(\vec{r})\rangle^{t}=\int d\vec{r}^{\,\prime}\int_{-\infty}^{t}e^{\varepsilon(t^{\prime}-t)}\varphi_{nn}(\vec{r},\vec{r}^{\,\prime};t,t^{\prime})\beta\mu^{*}(\vec{r}^{\,\prime};t^{\prime})dt^{\prime},\tag{4.8}$$

де

$$\varphi_{nn}(\vec{r},\vec{r}^{\,\prime};t,t^{\prime})=\int d\Gamma_{N}iL_{N}\hat{n}(\vec{r})T(t,t^{\prime})I_{n}(\vec{r}^{\,\prime};t^{\prime})\rho_{rel}(x^{N};t^{\prime})$$

$$=\frac{\partial}{\partial\vec{r}}\cdot D_{q}(\vec{r},\vec{r}^{\,\prime};t,t^{\prime})\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{r}^{\,\prime}}$$

— узагальнене ядро переносу, у якому усереднення виконується із степеневим розподілом (4.5). При $q=1$ узагальнене рівняння дифузії в статистиці Рені переходить в узагальнене рівняння статистики Гіббса [159]. В результаті отримуємо немарковське рівняння дифузії

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{n}(\vec{r})\rangle^{t}=\frac{\partial}{\partial\vec{r}}\cdot\int d\vec{r}^{\,\prime}\int_{-\infty}^{t}e^{\varepsilon(t^{\prime}-t)}D_{q}(\vec{r},\vec{r}^{\,\prime};t,t^{\prime})\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{r}^{\,\prime}}\beta\mu^{*}(\vec{r}^{\,\prime};t^{\prime})dt^{\prime},\tag{4.9}$$

$$D_{q}(\vec{r},\vec{r}^{\,\prime};t,t^{\prime})=\left\langle\hat{\vec{\nu}}(\vec{r})T(t,t^{\prime})\hat{\vec{\nu}}(\vec{r}^{\,\prime})\right\rangle_{rel}^{t}=\tag{4.10}$$

$$d\Gamma_{N}\hat{\vec{\nu}}(\vec{r})T(t,t^{\prime})\hat{\vec{\nu}}(\vec{r}^{\,\prime})\frac{1}{Z_{R}(t)}\left(1-\frac{q-1}{q}\beta\left(H-\int d\vec{r}\mu^{*}(\vec{r};t)\hat{n}(\vec{r})\right)\right)^{\frac{1}{q-1}}$$

— узагальнений коефіцієнт дифузії в статистиці Рені, у якому усереднення виконується із степеневим розподілом (4.5), де $\hat{\vec{\nu}}(\vec{r})=\sum_{j=1}^{N}\vec{\nu}_{j}\delta(\vec{r}-\vec{r}_{j})$ — мікроскопічна густина потоку числа частинок.

У наближені Маркова для узагальненого коефіцієнта дифузії у часі і просторі $D_{q}(\vec{r},\vec{r}^{\,\prime};t,t^{\prime})\approx D_{q}\delta(t-t')\delta(\vec{r}-\vec{r}^{\,\prime})$, виключивши параметр $\mu^{*}(\vec{r}^{\,\prime};t^{\prime})$ за допомогою умови самоузгодження (4.4), із (4.9) отримаємо рівняння q-дифузії із сталим коефіцієнтом:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{n}(\vec{r})\rangle^{t}=D_{q}\frac{\partial^{2}}{\partial r^{2}}\langle\hat{n}(\vec{r})\rangle^{t}.\tag{4.11}$$

При $q=1$ (4.11) – звичайне рівняння дифузії із сталим коефіцієнтом.

Для розкриття часової мультифрактальності в узагальненому рівнянні дифузії (4.9) подібно як у другому розділі використаємо наближення:

$$D_{q}(\vec{r},\vec{r}^{\prime};t,t^{\prime})=W(t,t^{\prime})\overline{D}_{q}(\vec{r},\vec{r}^{\prime}).$$

З врахуванням цього рівняння узагальнене рівняння дифузії можна подати у вигляді:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left\langle \hat{n}(\vec{r})\right\rangle^{t} = \int\limits_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)} W(t,t')\Psi(\vec{r};t')dt', \tag{4.12}$$

де

$$\Psi(\vec{r};t') = \int d\vec{r}'\frac{\partial}{\partial \vec{r}}\cdot \overline{D}_q(\vec{r},\vec{r}')\cdot\frac{\partial}{\partial \vec{r}'}\beta\mu^*(\vec{r}';t'). \tag{4.13}$$

Далі застосуємо перетворення Фур'є до рівняння (4.12), в результаті у частотному зображенні отримаємо:

$$i\omega n(\vec{r};\omega) = W(\omega)\Psi(\vec{r};\omega). \tag{4.14}$$

Частотну залежність функції пам'яті подамо у вигляді, із введенням часу релаксації τ (який характеризує процеси переносу частинок в системі):

$$W(\omega) = \frac{(i\omega)^{1-\xi}}{1+(i\omega\tau)^{\xi}}, 0<\xi\leq 1. \tag{4.15}$$

Тоді рівняння (4.14) можна подати у вигляді:

$$(1+(i\omega\tau)^{\xi})i\omega n_a(\vec{r};\omega) = (i\omega)^{1-\xi}\Psi_a(\vec{r};\omega). \tag{4.16}$$

Далі використаємо перетворення Фур'є до дробових похідних від функцій:

$$L\left({}_0D_t^{\xi}f(t);i\omega\right) = (i\omega)^{\xi}L(f(t);i\omega). \tag{4.17}$$

З його використанням, зворотне перетворення у рівнянні (4.16) до часової залежності, дає узагальнене рівняння типу Каттано-Максвелла з врахуванням часової фрактальності ($\langle\hat{n}(\vec{r})\rangle^{t} = n(\vec{r};t)$):

$$\tau^{\xi}\frac{\partial^{2\xi}}{\partial t^{2\xi}}n(\vec{r};t) + \frac{\partial^{\xi}}{\partial t^{\xi}}n(\vec{r};t) = \int d\vec{r}'\frac{\partial}{\partial \vec{r}}\cdot \overline{D}_q(\vec{r},\vec{r}')\cdot\frac{\partial}{\partial \vec{r}'}\beta\mu^*(\vec{r}';t). \tag{4.18}$$

При $\xi=1$ із (4.18) отримаємо рівняння дифузії Каттано-Максвелла:

$$\tau\frac{\partial^{2}}{\partial t^{2}}n(\vec{r};t) + \frac{\partial}{\partial t}n(\vec{r};t) = \int d\vec{r}'\frac{\partial}{\partial \vec{r}}\cdot \overline{D}_q(\vec{r},\vec{r}')\cdot\frac{\partial}{\partial \vec{r}'}\beta\mu^*(\vec{r}';t). \tag{4.19}$$

4.3 Чисельний розрахунок коефіцієнта аномальної дифузії та функції розсіювання

У математичному моделюванні дифузійних процесів важливою задачею є розрахунок узагальненого коефіцієнта дифузії, залежного від параметра Рені q. У марковському наближені у часі і нехтуючи просторовими кореляціями із (4.9) можна отримати рівняння дифузії, що співпадає із результатами роботи [162]. У даній роботі фактично запропоновано один із шляхів розрахунків коефіцієнта q-дифузії і отримано рівняння:

$$\frac{\partial}{\partial t}G_{q'}(r;t) = D_{q'}(r;t)\frac{\partial^2}{\partial r^2}G_{q'}(r;t),$$

де $G_{q'}(r;t)$ — функція розсіювання (густина-густина), яка може вимірюватися експериментально у процесах розсіювання нейтронів. Шляхом використання $q^{'}$ — представлення експоненти [92, 93] і розрахунків $G_{q'}(r;t)$ через нульовий і другий моменти автори отримали аналітичні вирази для коефіцієнта q - дифузії:

- $q^{'} > 1$

$$\frac{D_{q'}(r;t)}{D} = \frac{q^{'}-1}{2}\frac{N(r;t)}{M(r;t)}, \tag{4.20}$$

де

$$N\left(r;t\right) = \frac{r^*}{\sqrt{(q^{'}-1)}}\frac{K_{\nu+1}\left(\dfrac{r^*}{\sqrt{(q^{'}-1)}}\right)}{K_{\nu}\left(\dfrac{r^*}{\sqrt{(q^{'}-1)}}\right)} - 1 - 2\nu,$$

$$M(r;t) = 1 + \frac{(q^{'}-1)}{r^{*2}}(1-2\nu)\left(N(r;t)+1\right),$$

$r^* = \dfrac{r}{\sqrt{Dt}}$, $\nu = \dfrac{1}{(q^{'}-1)} - \dfrac{1}{2}$, K_ν - модифіковані функції Бесселя;

- $q^{'} < 1$

$$\frac{D_{q'}(r;t)}{D} = \frac{1-q'}{2}\frac{N'(r;t)}{M'(r;t)}, \tag{4.21}$$

де

$$N'(r^*;t) = \frac{r^*}{\sqrt{(1-q')}}\frac{J_{\mu+1}\left(\frac{r^*}{\sqrt{(1-q')}}\right)}{J_\mu\left(\frac{r^*}{\sqrt{(1-q')}}\right)} - 1,$$

$$M'(r^*;t) = -1 + \frac{(1-q')}{r^{*2}}(1-2\mu)(N'(r^*;t)+1),$$

J_μ – функції Бесселя.

$$\mu = \frac{1}{1-q'} + \frac{1}{2}.$$

Параметри q і q' обернено пропорційні: $q' = \frac{1}{q}$, $1-q' = \frac{q}{q-1}$. Для дослідження поведінки коефіцієнта q-дифузії за аналітичними виразами (4.20) і (4.21) ми провели числові оцінки при $\frac{1}{2}\langle(\vec{r}(t) - (\vec{r}(0)))^2\rangle \approx Dt = 0.5$. Відповідно була розрахована функція розсіювання.

Як бачимо із графіків (Рис. 4.1–4.2) при $q' > 1$, коли $q' = 1.05$ $D(r^*)$ має виражені осциляції, а при $q' = 2$ і $q' = 2.5$ плавно росте із збільшенням $r^* = \frac{r}{\sqrt{Dt}}$. При $q' < 1$ $D(r^*)$ має осцляційний характер, причому , при $q' = 0.75 = \frac{3}{4}$ вони наростають із збільшенням $r^* = \frac{r}{\sqrt{Dt}}$. Поведінка функції розсіювання подана на графіках (Рис. 4.3–4.4) при різних q' і якісно співпадає із даними роботи [38].

При $q' = 1$ отримуємо результат для нормальної дифузії [162]. Проведені числові оцінки коефіцінта q-дифузії (у безрозмірній формі, в залежності від $r^* = \frac{r}{\sqrt{Dt}}$) якісно вказують на різну поведінку його при $q' > 1$ і $q' < 1$. На рисунках (Рис. 4.5–4.7) подано результати числових розрахунків просторово-часової залежності коефіцієнта q-дифузії при $q' > 1$, а на рисунках (Рис. 4.8–4.10) — відповідно для просторово-часової залежності функції розсіювання. Як бачимо при $q = 1.05$ просторово-часова поведінка $D_q(r;t)/D$ має певні коливні особливості, які заходять у від'ємну області, що може свідчити про

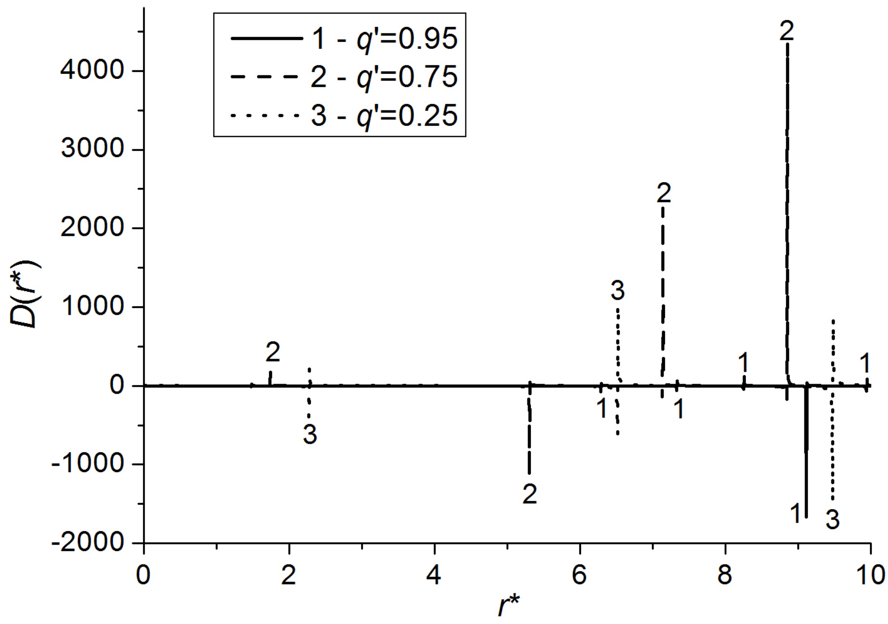


Рис. 4.1: Залежність $D(r^*)$ від параметра $r^* = \dfrac{r}{\sqrt{Dt}}$, коли $q^{'} < 1$

.

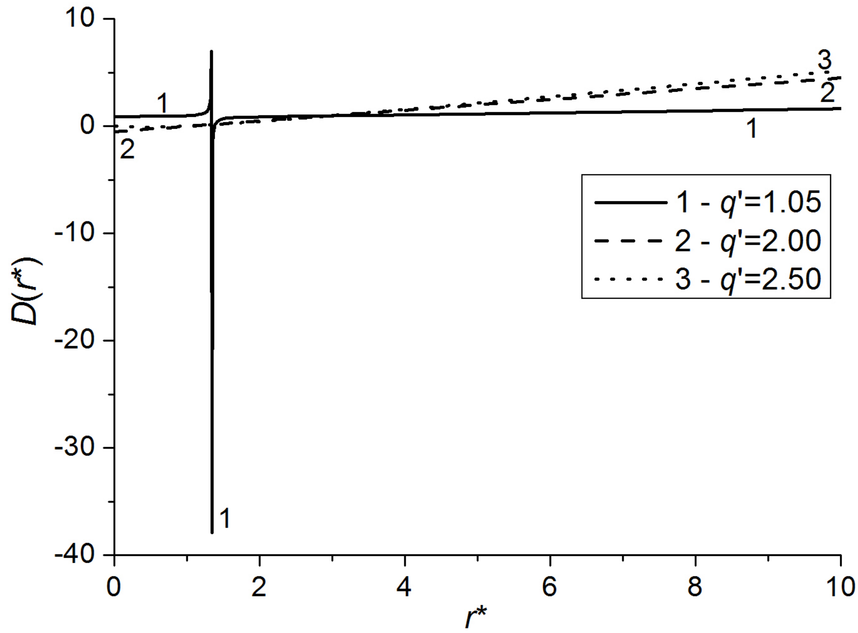


Рис. 4.2: Залежність $D(r^*)$ від параметра $r^* = \dfrac{r}{\sqrt{Dt}}$, коли $q^{'} > 1$

.

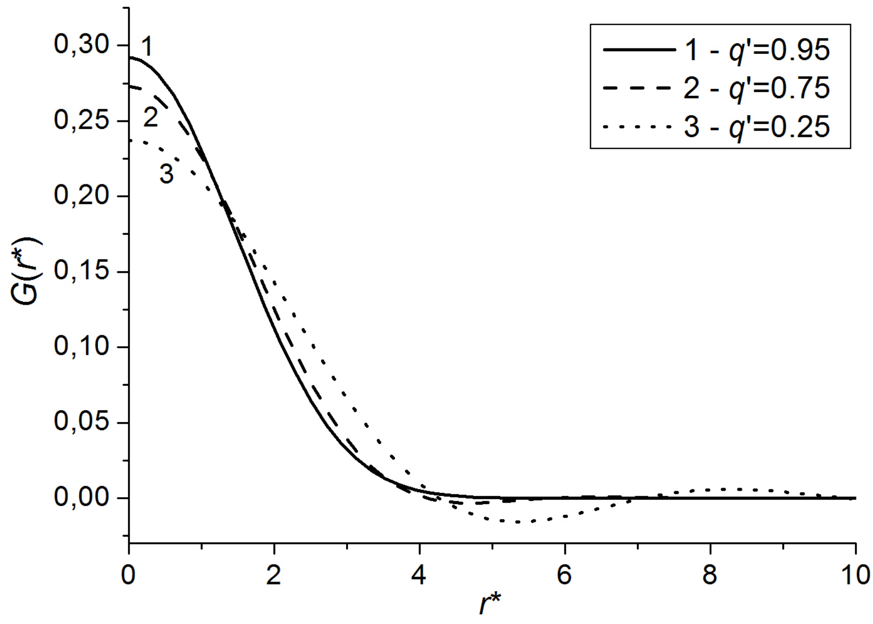


Рис. 4.3: Залежність $G(r^*)$ від параметра $r^* = \dfrac{r}{\sqrt{Dt}}$, коли $q^{'} < 1$

.

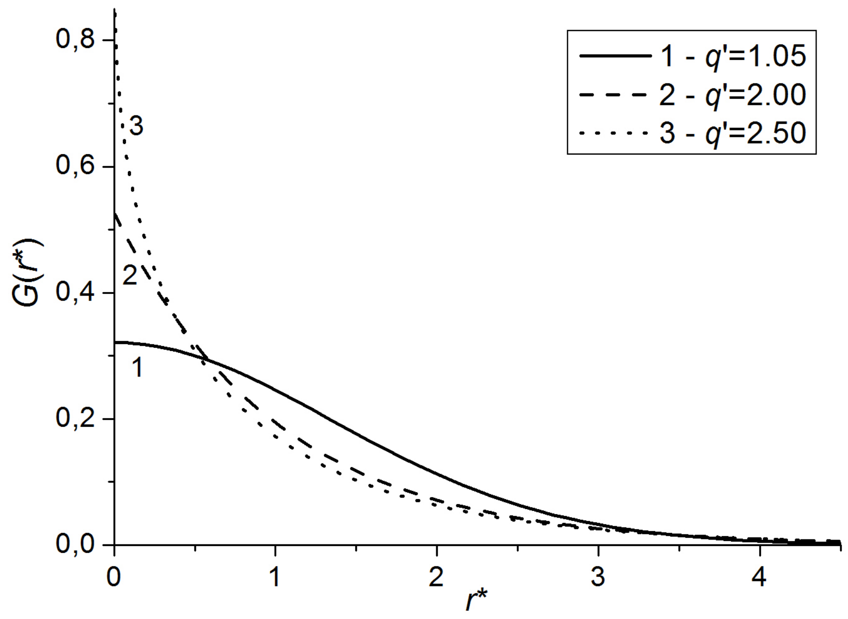
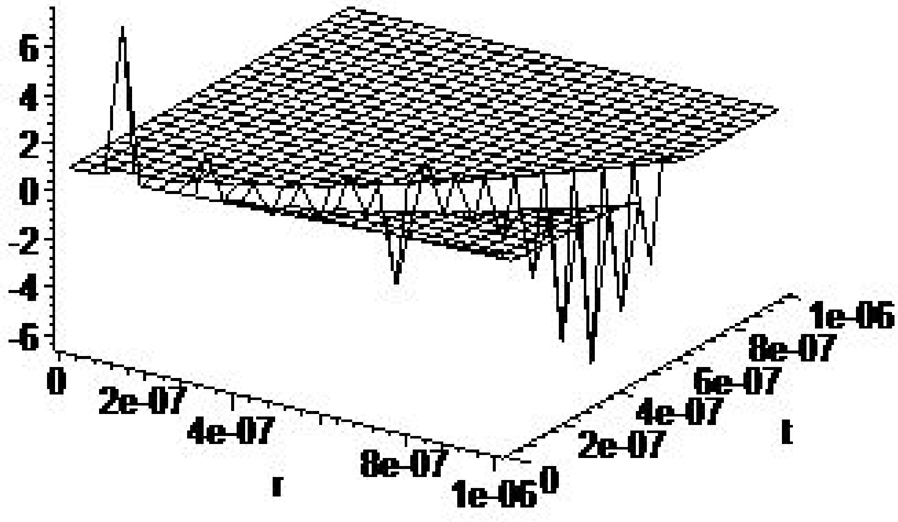


Рис. 4.4: Залежність $G(r^*)$ від параметра $r^* = \dfrac{r}{\sqrt{Dt}}$, коли $q^{'} > 1$

.



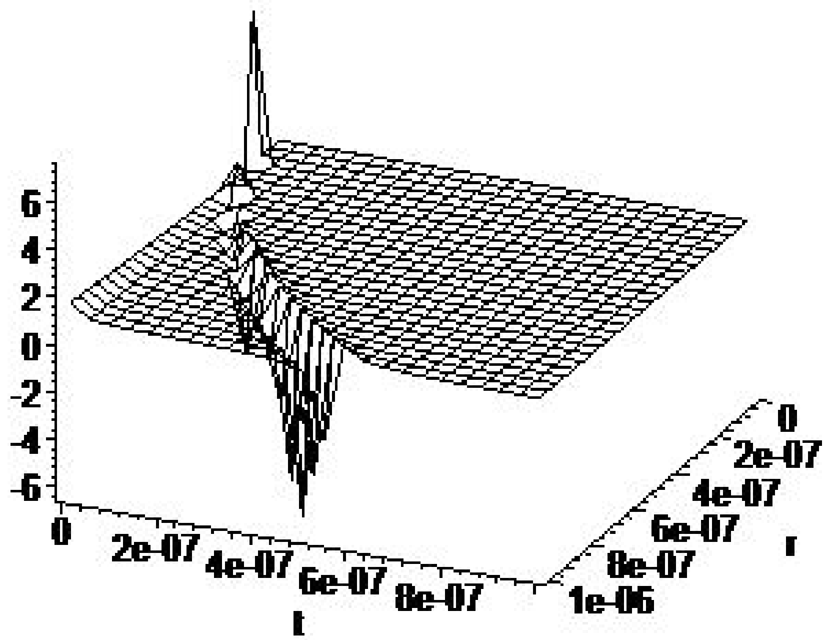


Рис. 4.5: Залежність $D_q(r;t)/D$ в різних проекціях від параметрів $r = 10^{-8}..10^{-6}$см., $t = 10^{-8}..10^{-6}$с., коли $q = 1.05$

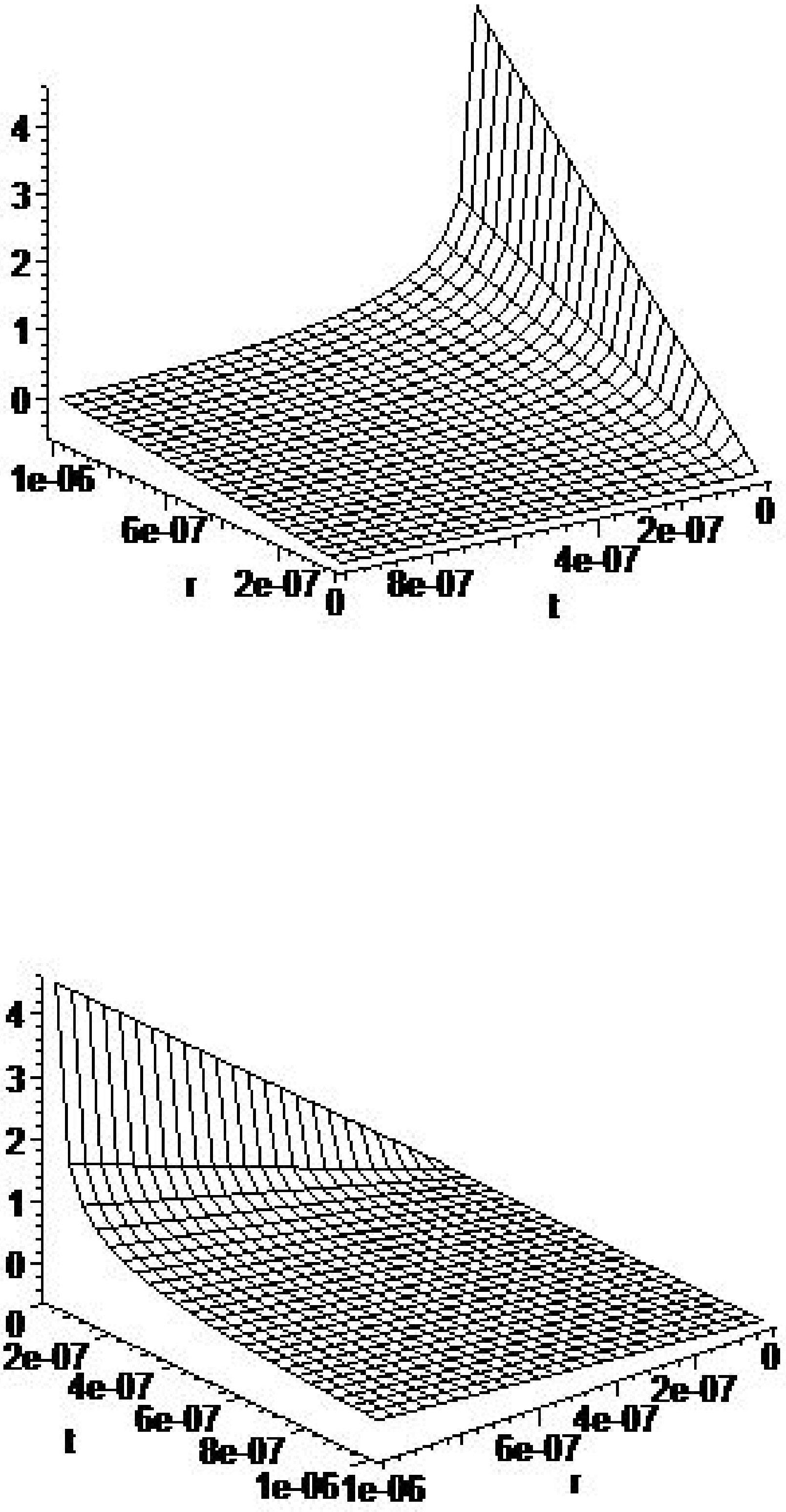


Рис. 4.6: Залежність $D_q(r;t)/D$ в різних проекціях від параметрів $r = 10^{-8}..10^{-6}$см., $t = 10^{-8}..10^{-6}$с., коли $q = 2.0$

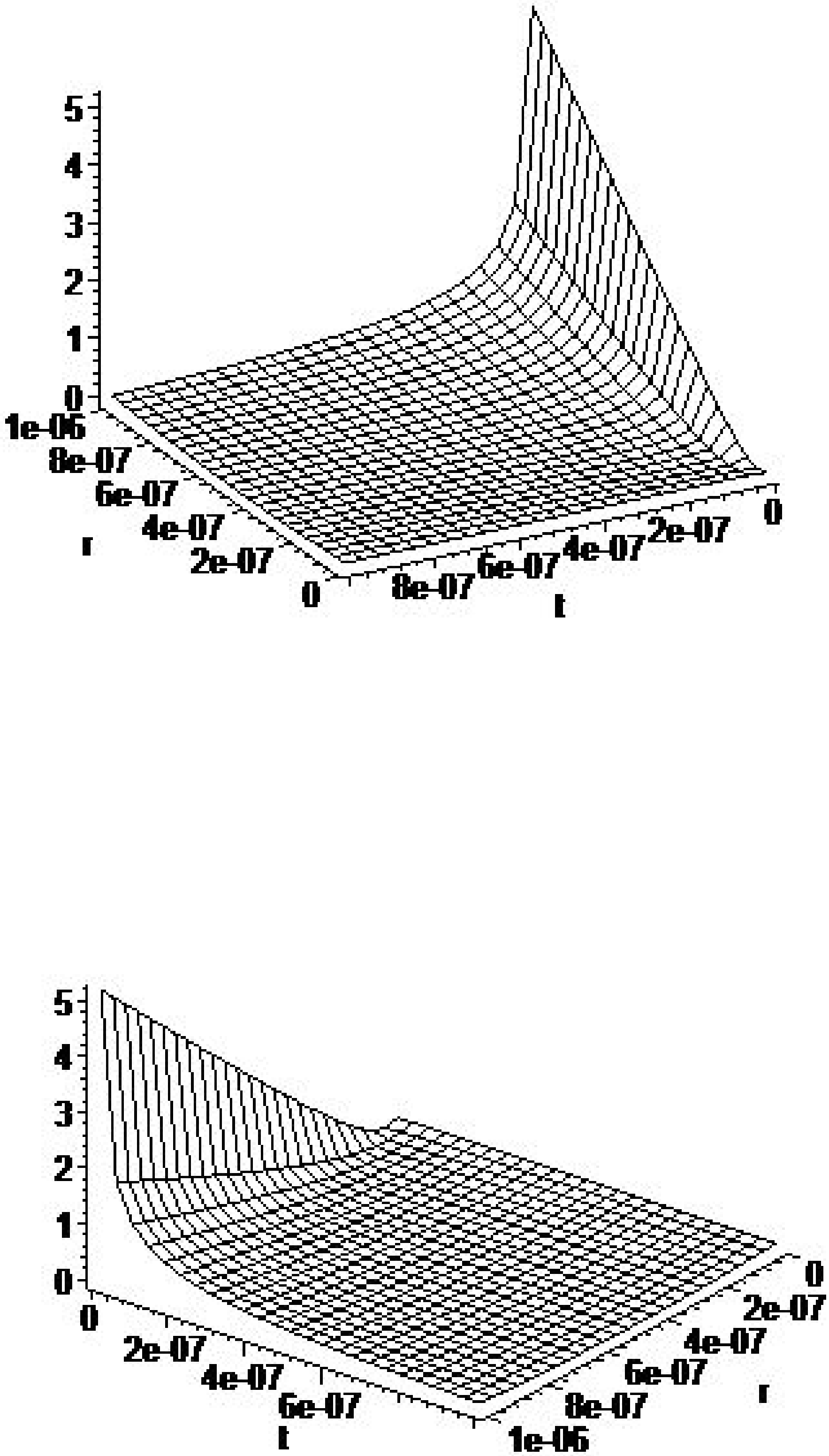


Рис. 4.7: Залежність $D_q(r;t)/D$ в різних проекціях від параметрів $r = 10^{-8}..10^{-6}$см., $t = 10^{-8}..10^{-6}$с., коли $q = 2.5$

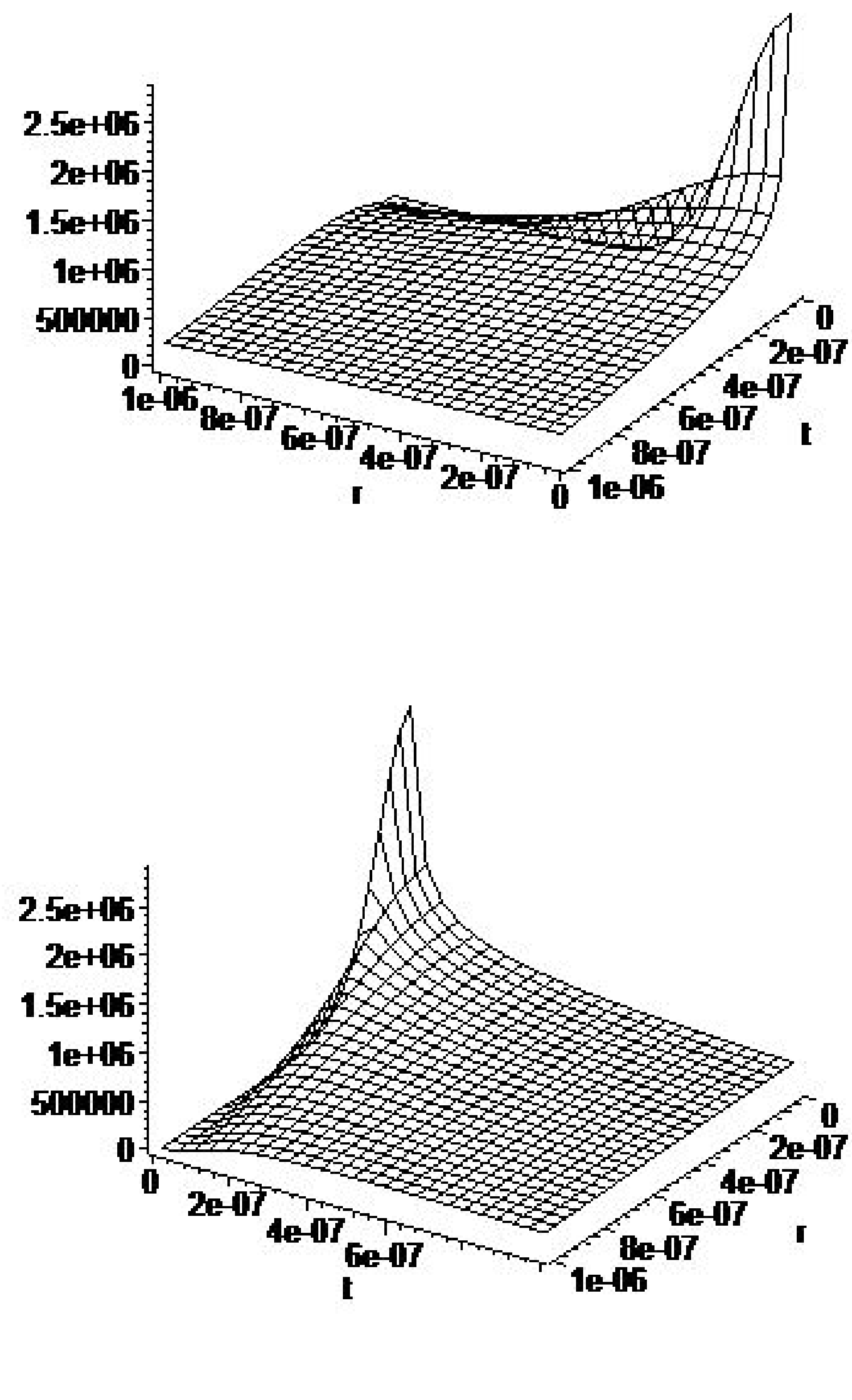


Рис. 4.8: Залежність $G(r;t)$ в різних проекціях від параметрів $r = 10^{-8}..10^{-6}$см., $t = 10^{-8}..10^{-6}$с., коли $q = 1.05$

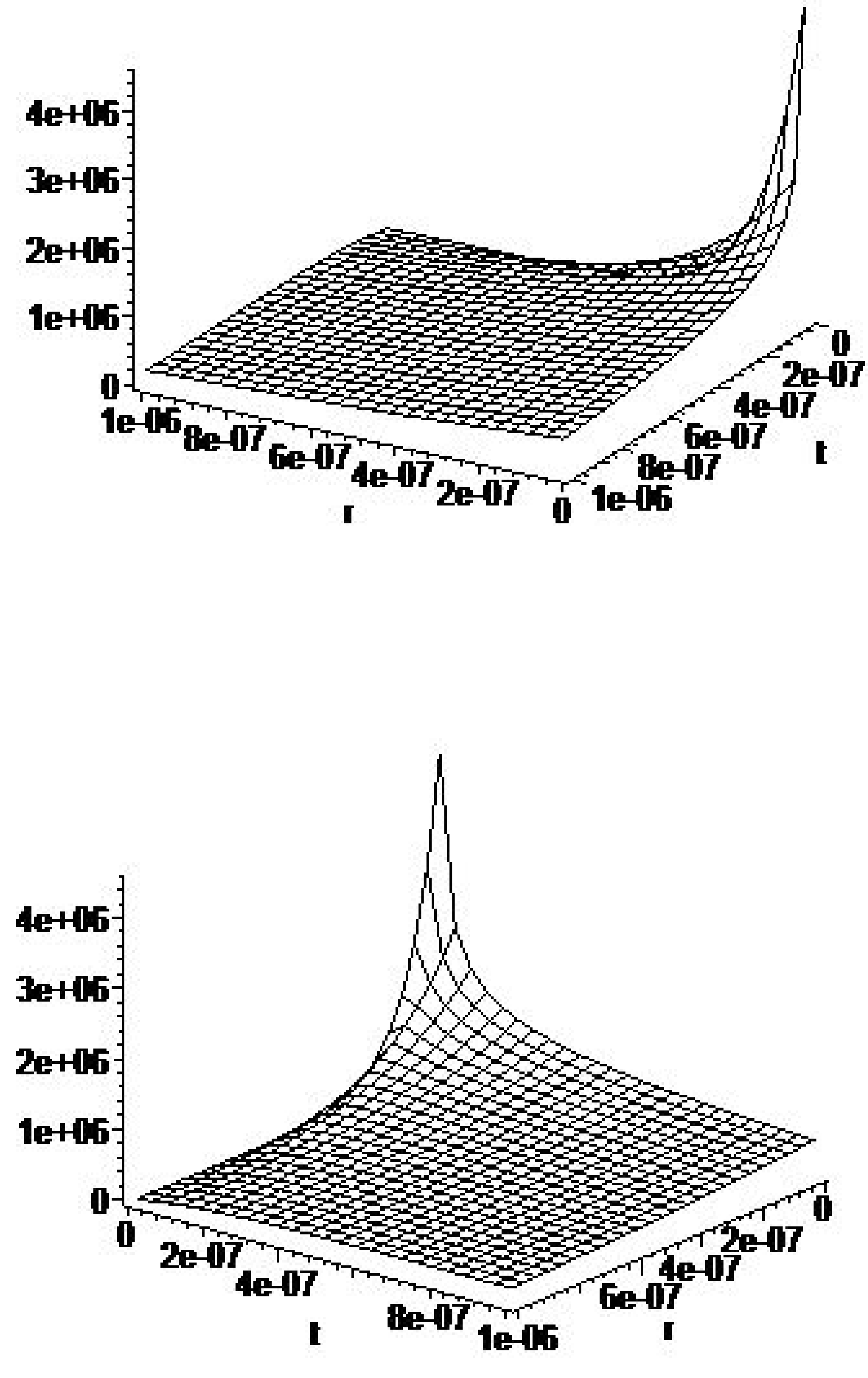
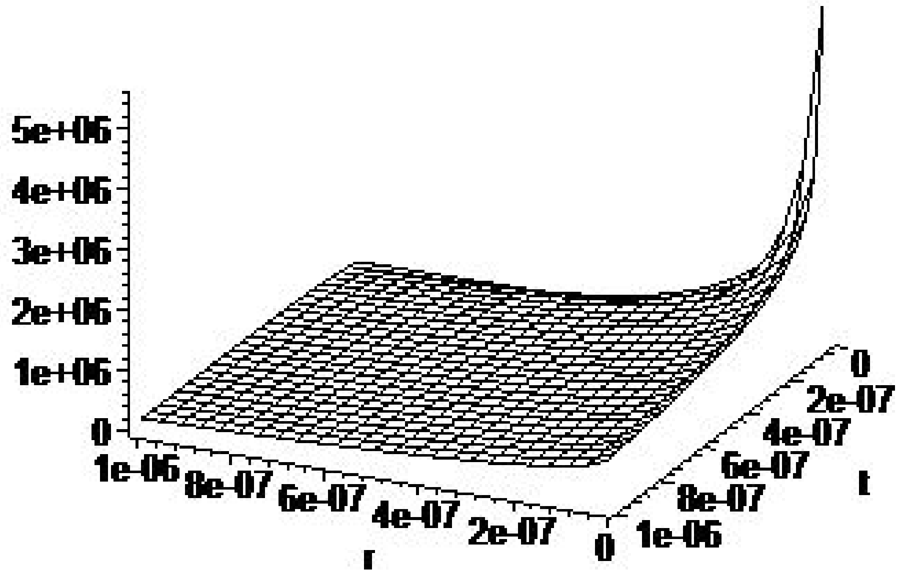


Рис. 4.9: Залежність $G(r;t)$ в різних проекціях від параметрів $r = 10^{-8}..10^{-6}$см., $t = 10^{-8}..10^{-6}$с., коли $q = 2.0$



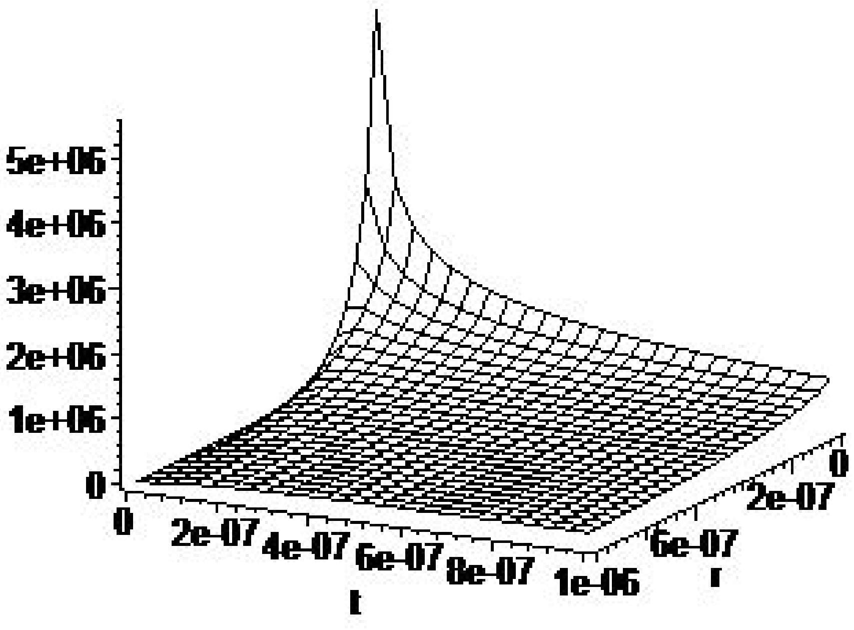
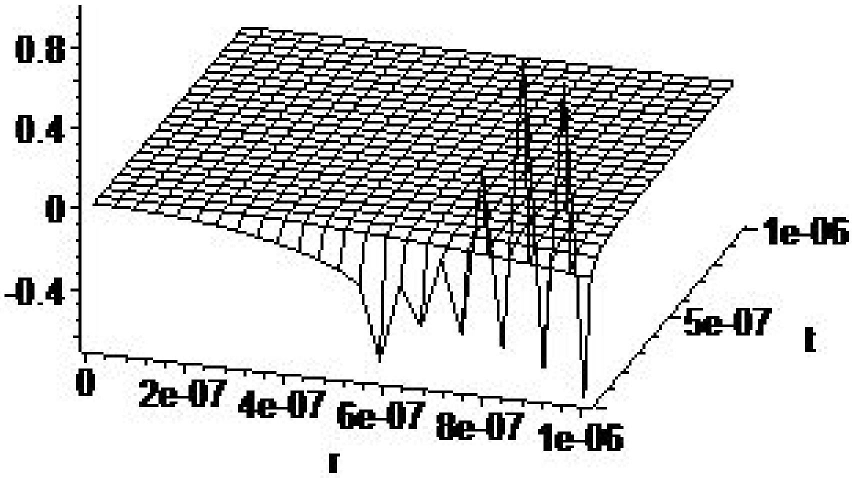


Рис. 4.10: Залежність $G(r;t)$ в різних проекціях від параметрів $r = 10^{-8}..10^{-6}$см., $t = 10^{-8}..10^{-6}$с., коли $q = 2.5$



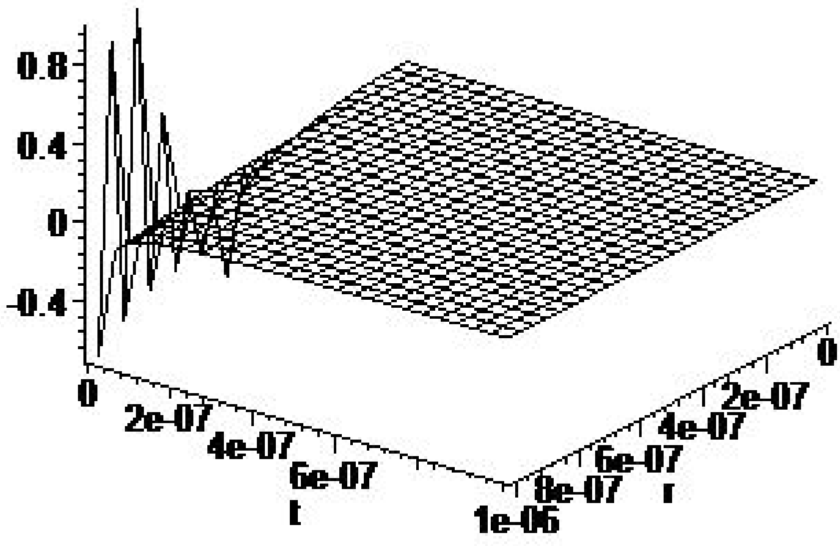
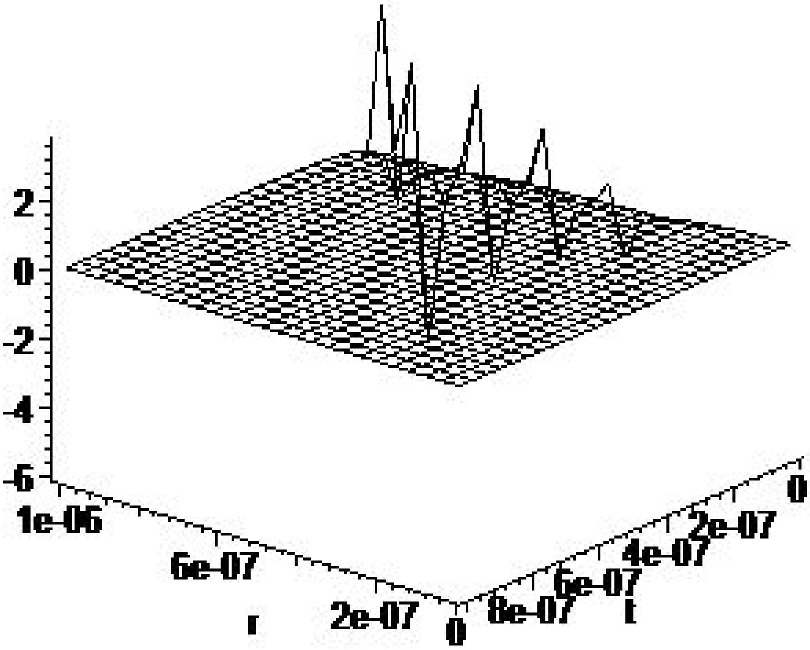


Рис. 4.11: Залежність $D_q(r;t)/D$ в різних проекціях від параметрів $r = 10^{-8}..10^{-6}$см., $t = 10^{-8}..10^{-6}$с., коли $q = 0.95$



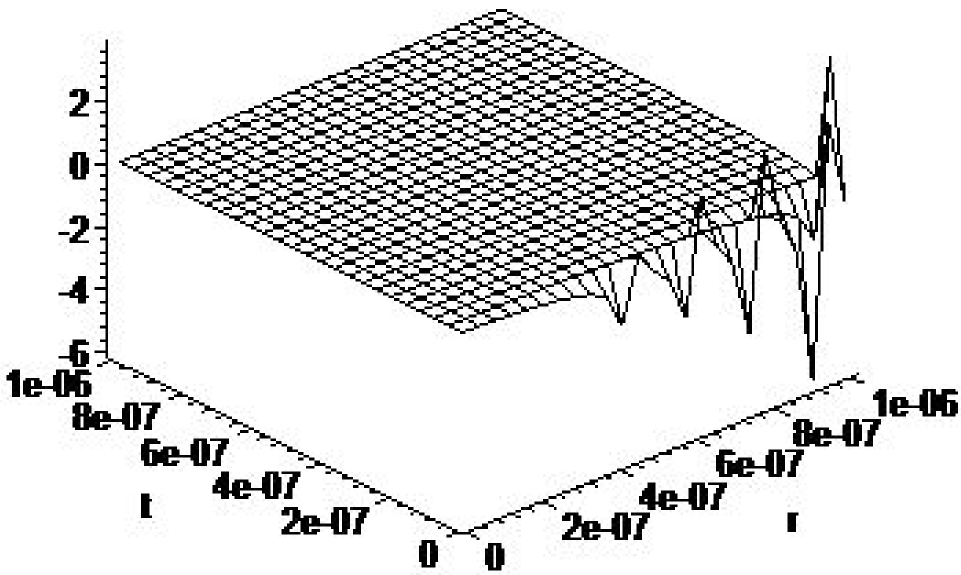
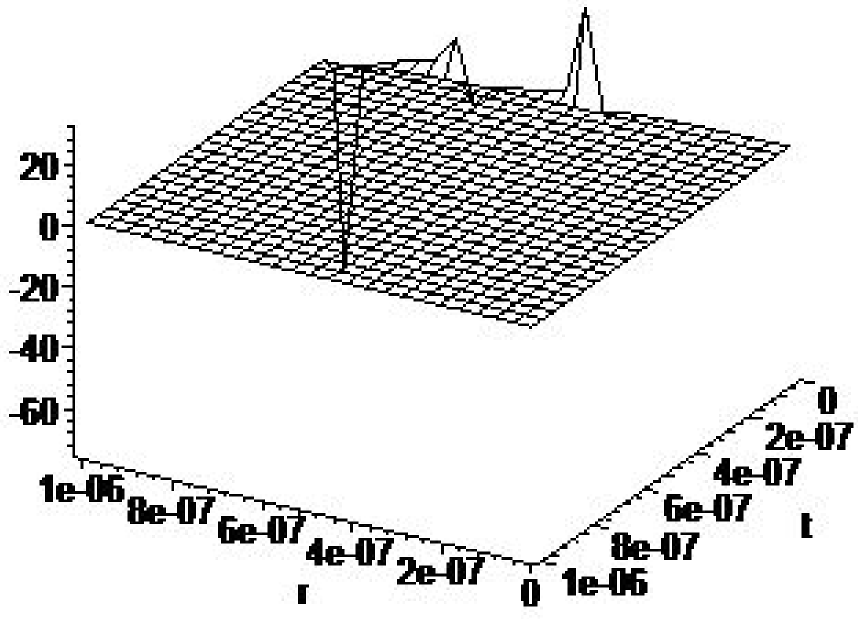


Рис. 4.12: Залежність $D_q(r;t)/D$ в різних проекціях від параметрів $r = 10^{-8}..10^{-6}$см., $t = 10^{-8}..10^{-6}$с., коли $q = 0.75$



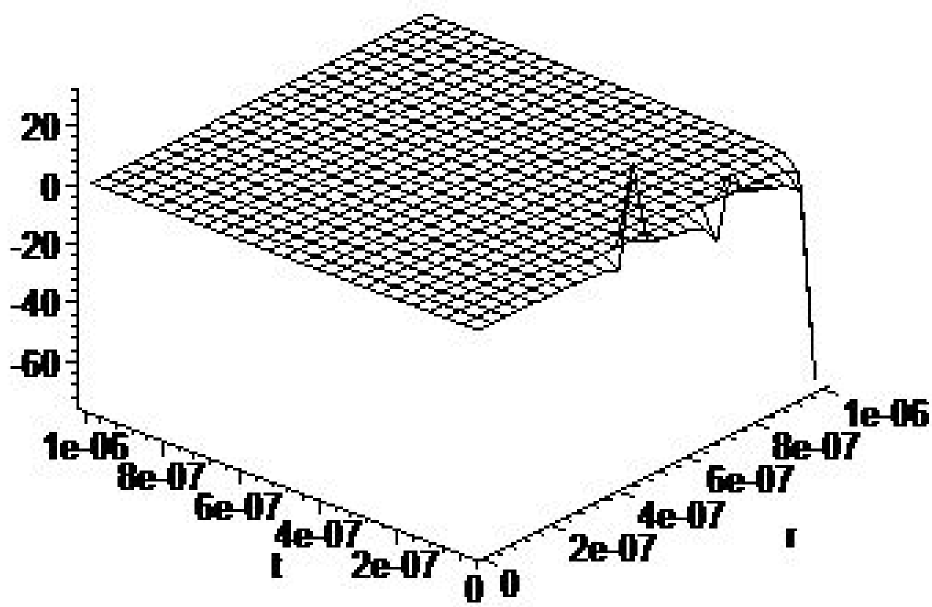


Рис. 4.13: Залежність $D_q(r;t)/D$ в різних проекціях від параметрів $r = 10^{-8}..10^{-6}$см., $t = 10^{-8}..10^{-6}$с., коли $q = 0.25$

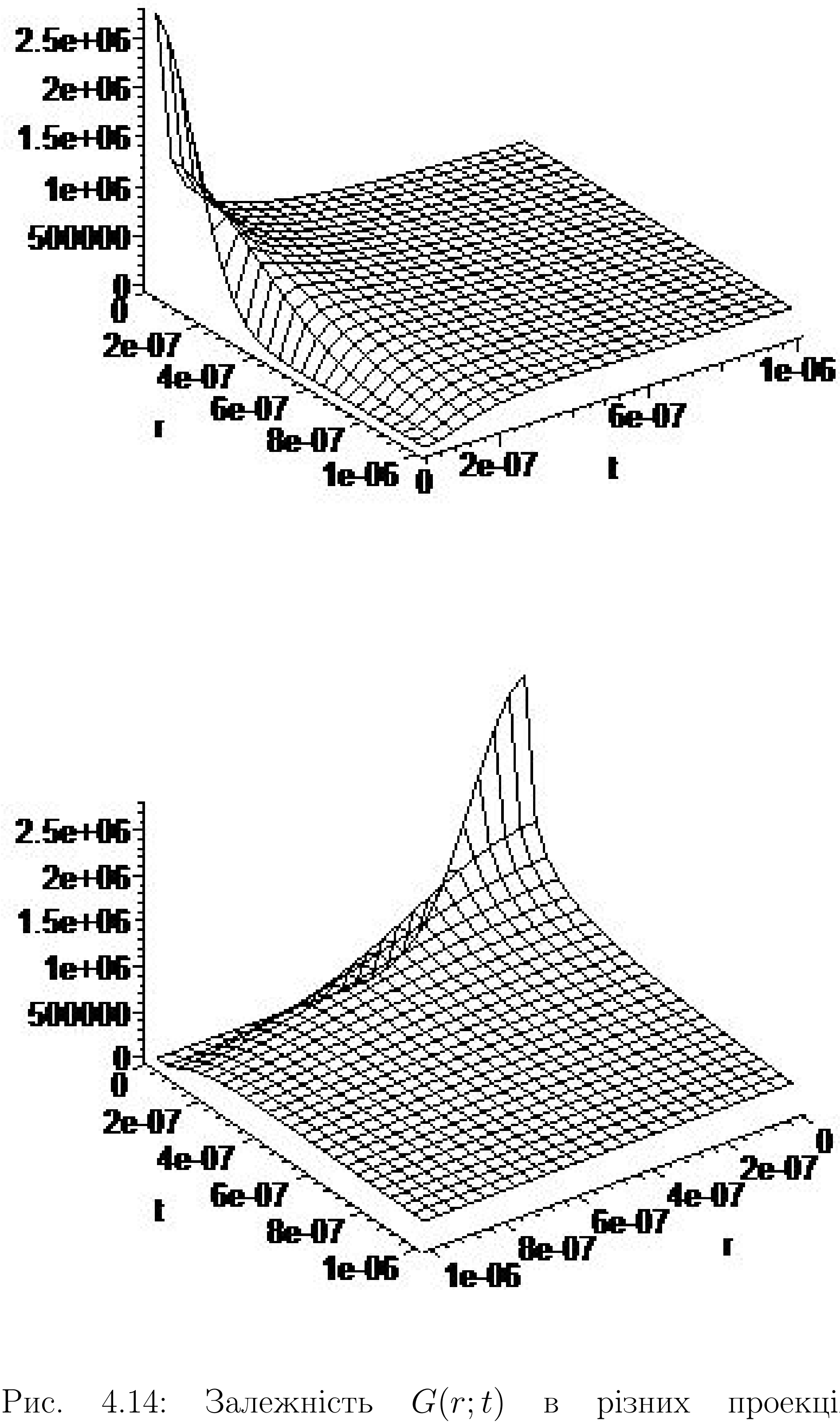
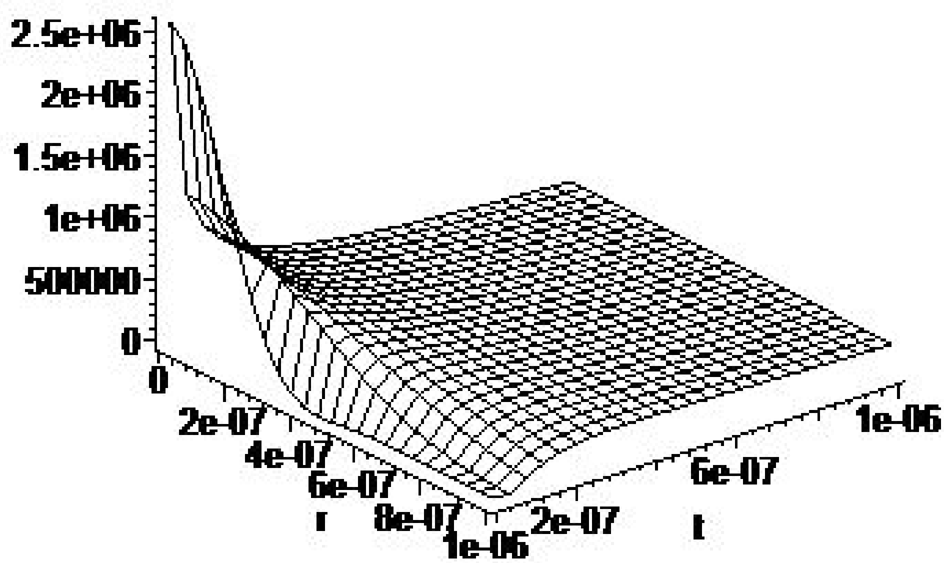


Рис. 4.14: Залежність $G(r;t)$ в різних проекціях від параметрів $r = 10^{-8}..10^{-6}$см., $t = 10^{-8}..10^{-6}$с., коли $q = 0.95$



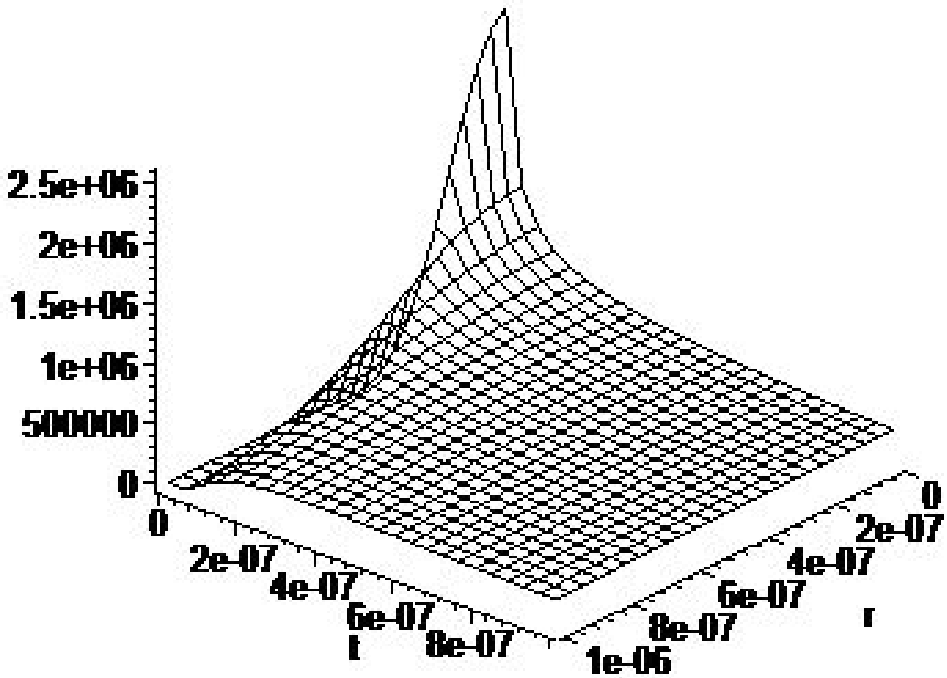
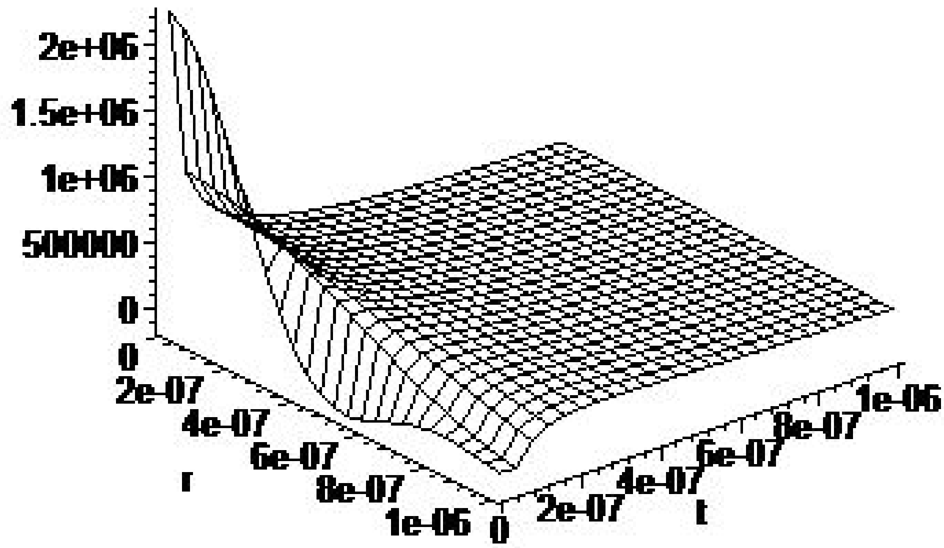


Рис. 4.15: Залежність $G(r;t)$ в різних проекціях від параметрів $r = 10^{-8}..10^{-6}$см., $t = 10^{-8}..10^{-6}$с., коли $q = 0.75$



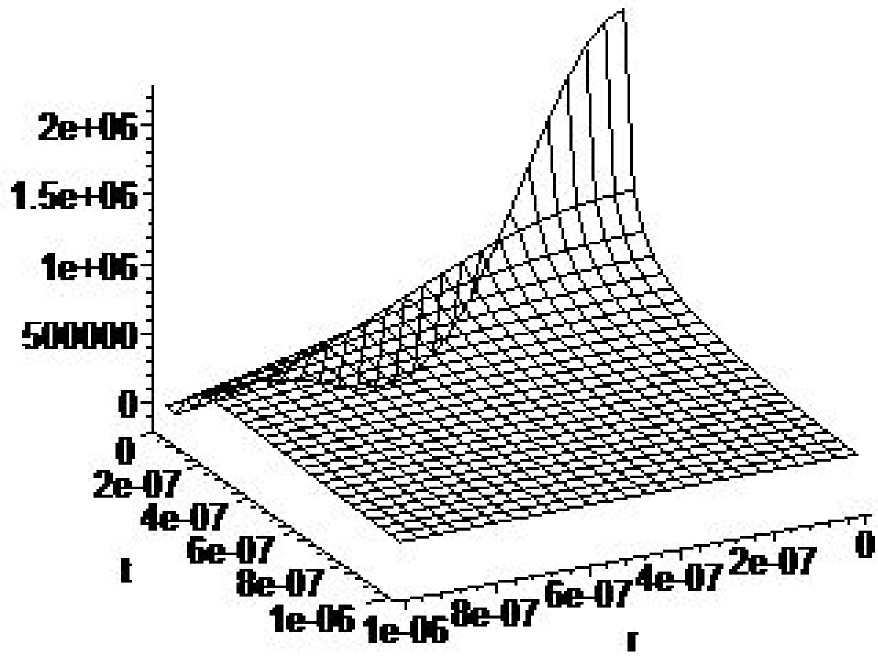


Рис. 4.16: Залежність $G(r;t)$ в різних проекціях від параметрів $r = 10^{-8}..10^{-6}$см., $t = 10^{-8}..10^{-6}$с., коли $q = 0.25$

сильну зміну характеру руху частинок, однак це не відбивається на поведінці функції розсіювання (Рис. 4.8). При $q = 2.0$, $q = 2.5$ просторово-часова поведінка коефіцієнта q-дифузії та функції розсіювання є плавною. На рисунках (Рис. 4.11–4.13) подано результати числових розрахунків просторово-часової залежності коефіцієнта q-дифузії при $q^{'} < 1$, а на рисунках (Рис. 4.14–4.16) — відповідно для просторово-часової залежності функції розсіювання. У поведінці q-дифузії при $q^{'} < 1$ спостерігаються сильні осциляції при малих r і t, які певним чином відбиваються на функції розсіювання – вона має виражені просторові осциляції.

Природа такої поведінки коефіцієнта q-дифузії є складною і потребує більш детальних розрахунків із явним врахуванням специфіки розглядуваної системи взаємодіючих частинок. Математичне моделювання дифузійних процесів на основі коефіцієнта q - дифузії для модельної системи показали певну "аномальність"у просторово часовій залежності, що спостерігається в комп'ютерному моделюванні [224–226].

Необхідно зробити певні висновки, що при виводі узагальненого рівняння q-дифузії (немарковського рівняння) в рамках статистики Рені ми не отримали рівняння у дробових похідних.

4.4 Висновки до розділу 4

На основі методу нерівноважного статистичного оператора Зубарєва та принципу максимуму ентропії Рені отримано узагальнене (немарковське) рівняння дифузії, у якому коефіцієнт дифузії розраховується із степеневим розподілом Рені. Коли параметри Рені $q = 1$ отримуємо результат статистики Гіббса [159]. При виводі узагальненого рівняння q-дифузії (немарковського рівняння) в рамках статистики Рені ми не отримали рівняння у дробових похідних.

Проведені числові оцінки коефіцієнта q-дифузії, отриманого у роботі [162] при $q^{'} > 1$ і $q^{'} < 1$ вказують на складну поведінку і очевидно на різні механізми дифузійних (суб- чи супер) процесів, які можуть протікати у системі взаємодіючих частинок. З цієї точки зору важливою задачею є розрахунок узагальненого коефіцієнта дифузії (4.10) для конкретних систем при різних значення параметра Рені q. Математичне моделювання дифузійних процесів на основі коефіцієнта q-дифузії для модельної системи показали певну "аномальність"у просторово-часовій залежності, що спостерігається в комп'ютерному моделюванні [224–226].

Розділ 5

МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ КІНЕТИЧНИХ ПРОЦЕСІВ В СТАТИСТИЦІ НА ОСНОВІ ЕНТРОПІЇ РЕНІ

У даному розділі подано модель опису кінетичних та гідродинамічних процесів для системи взаємодіючих частинок, що перебувають у нерівноважних станах, далеких від рівноваги. В основі будь-яких дифузійних процесів у просторово неоднорідних системах лежать кінетичні процеси. Тому важливо сформулювати відповідну кінетичну модель. Виходячи із принципу максимуму ентропії Рені отримано релевантну функцію розподілу і на основі неї нерівноважну функцію розподілу частинок, як розв'язок рівняння Ліувілля. За допомогою нерівноважної функції розподілу отримано узагальнені кінетичні рівняння для нерівноважних одно- та двочастинкових функцій розподілу. Розкрито внутрішню структуру узагальнених функцій пам'яті, що дало можливість показати, що кінетичні рівняння є типу Фоккера-Планка, які містять кореляційні функції другого і вищих порядків за динамічними згінними: мікроскопічними густинами числа частинок, їх імпульсу та сили у просторі координат та імпульсів. Функції пам'яті четвертого порядку за змінними допускають апроксимації, що відповідають ідеології теорії взаємодіючих мод, і можуть бути використані для математичного моделювання нелінійних процесів.

Результати цього розділу опубліковані у [29, 30, 39].

5.1 Узагальнені кінетичні рівняння в статистиці Рені

Для опису кінетичних процесів у класичних густих газах і рідинах далеких від рівноваги в якості параметрів скороченого опису можуть бути вибрані нерівноважні одно- та двочастинкові функції розподілу

$$f_1(x;t) = \langle \hat{n}_1(x) \rangle^t, \qquad f_2(x,x';t) = \langle \hat{n}_2(x,x') \rangle^t, \tag{5.1}$$

де

$$\hat{n}_1(x) = \sum_{j=1}^{N} \delta(x - x_j),$$

$$\hat{n}_2(x,x') = \sum_{j=1}^{N} \sum_{l=1}^{N} \delta(x - x_j)\delta(x' - x_l)$$

— одно- та двочастинкові мікроскопічні фазові густини N частинок в об'ємі V. Вони визначають густини числа частинок, імпульсу і повної енергії (поданої сумою кінетичної $\hat{\varepsilon}^{\text{kin}}$ і потенціальної $\hat{\varepsilon}^{\text{int}}$ частин)

$$\hat{n}(\vec{r}) = \int \mathrm{d}\vec{p}\, \hat{n}_1(\vec{r},\vec{p}), \qquad \hat{\vec{p}}(\vec{r}) = \int \mathrm{d}\vec{p}\, \hat{n}_1(\vec{r},\vec{p})\, \vec{p},$$

$$\hat{\varepsilon}^{\text{kin}}(\vec{r}) = \int \mathrm{d}\vec{p}\, \hat{n}_1(\vec{r},\vec{p}) \frac{p^2}{2m},$$

$$\hat{\varepsilon}^{\text{int}}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \int \mathrm{d}\vec{p} \int \mathrm{d}\vec{p}\,' \int \mathrm{d}\vec{r}\,' \Phi(|\vec{r} - \vec{r}\,'|) \hat{n}_2(\vec{r},\vec{p};\vec{r}\,',\vec{p}\,'),$$

середні значення яких

$$\langle \hat{n}(\vec{r}) \rangle^t = \int \mathrm{d}\vec{p} f_1(\vec{r},\vec{p};t), \qquad \langle \hat{\vec{p}}(\vec{r}) \rangle^t = \int \mathrm{d}\vec{p} f_1(\vec{r},\vec{p};t) \vec{p},$$

$$\langle \hat{\varepsilon}^{\text{kin}}(\vec{r}) \rangle^t = \int \mathrm{d}\vec{p} f_1(\vec{r},\vec{p};t) \frac{p^2}{2m},$$

$$\langle\hat{\varepsilon}^{\rm int}(\vec{r})\rangle^t = \frac{1}{2}\int {\rm d}\vec{p}\int {\rm d}\vec{p}\,'\int {\rm d}\vec{r}\,'\Phi(|\vec{r}-\vec{r}\,'|)f_2(\vec{r},\vec{p};\vec{r}\,',\vec{p}\,';t)$$

задовольняють локальні закони збереження:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{n}(\vec{r})\rangle^t = -\frac{1}{m}\vec{\nabla}\cdot\langle\hat{\vec{p}}(\vec{r})\rangle^t,$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{\vec{p}}(\vec{r})\rangle^t = -\vec{\nabla} : \left(\langle\hat{\overleftrightarrow{T}}^{\rm kin}(\vec{r})\rangle^t + \langle\hat{\overleftrightarrow{T}}^{\rm int}(\vec{r})\rangle^t\right),$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{\varepsilon}(\vec{r})\rangle^t = -\vec{\nabla}\cdot\left(\langle\hat{\vec{j}}_E^{\rm kin}(\vec{r})\rangle^t + \langle\hat{\vec{j}}_E^{\rm int}(\vec{r})\rangle^t\right). \tag{5.2}$$

Тут $\langle\hat{\varepsilon}(\vec{r})\rangle^t = \langle\hat{\varepsilon}^{\rm kin}(\vec{r})\rangle^t + \langle\hat{\varepsilon}^{\rm int}(\vec{r})\rangle^t$ — нерівноважне середнє значення густини повної енергії, а $\vec{\nabla} = \partial/\partial\vec{r}$. У рівнянні (5.2)

$$\langle\hat{\overleftrightarrow{T}}^{\rm kin}(\vec{r})\rangle^t = \int {\rm d}\vec{p}\,\frac{\vec{p}\,\vec{p}}{m}f_1(\vec{r},\vec{p};t)$$

— нерівноважне середнє значення густини кінетичної частини тензора в'язких напружень,

$$\langle\hat{\overleftrightarrow{T}}^{\rm int}(\vec{r})\rangle^t = \frac{1}{2}\int {\rm d}\vec{p}\int {\rm d}\vec{p}\,'\int {\rm d}\vec{r}\,'\frac{\partial}{\partial|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\Phi(|\vec{r}-\vec{r}\,'|)\times \tag{5.3}$$

$$\times\frac{(\vec{r}-\vec{r}\,')(\vec{r}-\vec{r}\,')}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}f_2(\vec{r},\vec{r}\,';\vec{p},\vec{p}\,';t)$$

— нерівноважне середнє значення густини потенціальної частини тензора в'язких напружень.

$$\langle\hat{\vec{j}}_E^{\rm kin}(\vec{r})\rangle^t = \int {\rm d}\vec{p}\,\frac{p^2}{2m}\,\vec{p}\,f_1(\vec{r},\vec{p};t)$$

і

$$\langle\hat{\vec{j}}_E^{\rm int}(\vec{r})\rangle^t = \int {\rm d}\vec{p}\int {\rm d}\vec{p}\,'\int {\rm d}\vec{r}\,'\left[\frac{\vec{p}}{m}\Phi(|\vec{r}-\vec{r}\,'|) - \Phi(|\vec{r}-\vec{r}\,'|)\frac{(\vec{r}-\vec{r}\,')}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\right]\times$$

$$\times f_2(\vec{r},\vec{r}\,';\vec{p},\vec{p}\,';t)$$

— нерівноважні середні значення густин кінетичної і потенціальної частин потоку енергії, відповідно. Розкривши усереднення у правих частинах рівнянь (5.2) — отримаємо узагальнені рівняння гідродинаміки, в основі яких лежать закони збереження. Із приведених співвідношень слідує, що нерівноважна одночастинкова функція розподілу визначає макроскопічні нерівноважні густини числа частинок, їх імпульсу, а також кінетичні частини повної енергії, тензора в'язких напружень і потоку енергії. Тоді як нерівноважна двочастинкова функція розподілу визначає потенціальні частини повної енергії, тензора в'язких напружень і потоку енергії. Таким чином, у системах далеких від рівноваги нелінійні гідродинамічні флуктуації зумовлені нелінійними флуктуаціями нерівноважних одно- та двочастинкових функцій розподілу, для яких необхідно побудувати відповідні кінетичні рівняння. У такому випадку, коли нерівноважні одно- та двочастинкова функції розподілу $f_1(x;t) = \langle\hat{n}_1(x)\rangle^t$ і $f_2(x,x';t) = \langle\hat{n}_2(x,x')\rangle^t$ вибрані як параметри скороченого опису, відповідно (4.2) релевантна функція розподілу буде мати наступний вигляд:

$$\varrho_{\mathrm{rel}}(t) = \frac{1}{Z_R(t)}\Bigg\{1 \;-\; \frac{q-1}{q}\Bigg[\int \mathrm{d}a(x;t)\delta\hat{n}_1(x;t) + \\ + \int \mathrm{d}x \int \mathrm{d}x' b(x,x';t)\delta\hat{n}_2(x,x';t)\Bigg]\Bigg\}^{\frac{1}{q-1}}, \tag{5.4}$$

де

$$Z_R(t) = \int \mathrm{d}\Gamma_N \Bigg\{1 \;-\; \frac{q-1}{q}\Bigg[\int \mathrm{d}x a(x;t)\delta\hat{n}_1(x;t) \\ + \int \mathrm{d}x \int \mathrm{d}x' b(x,x';t)\delta\hat{n}_2(x,x';t)\Bigg]\Bigg\}^{\frac{1}{q-1}}$$

— статистична сума релевантної функції розподілу. Параметри $a(x;t)$ і $b(x,x';t)$ визначаються із наступних умов самоузгодження:

$$\langle\hat{n}_1(x)\rangle^t = \langle\hat{n}_1(x)\rangle^t_{\mathrm{rel}}, \qquad \langle\hat{n}_2(x,x')\rangle^t = \langle\hat{n}_2(x,x')\rangle^t_{\mathrm{rel}}. \tag{5.5}$$

Релевантну функцію розподілу (5.4) зручно подати в іншій формі

$$\varrho_{\mathrm{rel}}(t) = \frac{1}{Z_R^*(t)}\Bigg\{1 \;-\; \frac{q-1}{q}\Bigg[\int \mathrm{d}x a^*(x;t)\hat{n}_1(x) + \int \mathrm{d}x \int \mathrm{d}x' b^*(x,x';t)\hat{n}_2(x,x')\Bigg]\Bigg\}^{\frac{1}{q-1}}, \tag{5.6}$$

записавши множник Лагранжа наступним чином:

$$\begin{aligned} a^*(x;t) &= a(x;t)\Bigg\{1 + \frac{q-1}{q} \\ &\times \Bigg[\int \mathrm{d}a(x;t)f_1(x;t) + \int \mathrm{d}x \int \mathrm{d}x' b(x,x';t)f_2(x,x';t)\Bigg]\Bigg\}^{-1}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} b^*(x,x';t) &= b(x,x';t)\Bigg\{1 + \frac{q-1}{q} \\ &\times \Bigg[\int \mathrm{d}a(x;t)f_1(x;t) + \int \mathrm{d}x \int \mathrm{d}x' b(x,x';t)f_2(x,x';t)\Bigg]\Bigg\}^{-1}. \end{aligned}$$

Важливо зазначити, що у випадку $q = 1$ множники $a^*(x;t) = a(x;t)$ і $b^*(x,x';t) = b(x,x';t)$, ми отримаємо релевантну функцію розподілу, що відповідає статистиці Гіббса [143].

Тепер, використавши результати підрозділу 1.3 та (4.5), ми можемо записати нерівноважний статистичний оператор у наступному вигляді:

$$\begin{aligned} \varrho(t) &= \varrho_{\mathrm{rel}}(t) + \int \mathrm{d}x' \int_{-\infty}^{t} \mathrm{e}^{\varepsilon(t'-t)} T(t,t') a(x';t') I_n^{(1)}(x';t') \varrho_{\mathrm{rel}}(t) \mathrm{d}t' \\ &+ \int \mathrm{d}x' \int \mathrm{d}x'' \int_{-\infty}^{t} \mathrm{e}^{\varepsilon(t'-t)} T(t,t') b(x',x'';t') I_n^{(2)}(x',x'';t') \varrho_{\mathrm{rel}}(t) \mathrm{d}t', \end{aligned} \tag{5.7}$$

де

$$\begin{aligned} I_n^{(1)}(x;t) &= [1 - P(t)]\,\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\mathrm{i}L_N \hat{n}_1(x), \\ I_n^{(2)}(x,x';t) &= [1 - P(t)]\,\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\mathrm{i}L_N \hat{n}_2(x,x') \end{aligned}$$

— узагальнені потоки, у яких функція $\psi(t)$ рівна

$$\psi(t) = 1 - \frac{q-1}{q}\left[\int \mathrm{d}x a^*(x;t)\hat{n}_1(x;t) + \int \mathrm{d}x \int \mathrm{d}x' b^*(x,x';t)\hat{n}_2(x,x';t)\right].$$

За допомогою (5.7), відповідно (4.6), ми отримаємо систему узагальнених кінетичних рівнянь кінетичних рівнянь для параметрів скороченого опису $f_1(x;t) = \langle \hat{n}_1(x) \rangle^t$ і $f_2(x,x';t) = \langle \hat{n}_2(x,x') \rangle^t$:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\langle \hat{n}_1(x)\rangle^t &= \int \mathrm{d}x' \Phi^{11}_{nn}(x,x';t)a(x';t) \\ &+ \int \mathrm{d}x' \int \mathrm{d}x'' \Phi^{12}_{nn}(x;x',x'';t)b(x',x'';t) \\ &+ \int \mathrm{d}x' \int_{-\infty}^{t} \mathrm{e}^{\varepsilon(t'-t)}\varphi^{11}_{nn}(x,x';t,t')a(x';t')\mathrm{d}t' \\ &+ \int \mathrm{d}x' \int \mathrm{d}x'' \int_{-\infty}^{t} \mathrm{e}^{\varepsilon(t'-t)}\varphi^{12}_{nn}(x;x',x'';t,t')b(x',x'';t')\mathrm{d}t',\end{aligned} \tag{5.8}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\langle \hat{n}_2(x,x')\rangle^t &= \int \mathrm{d}x'' \Phi^{21}_{nn}(x,x';x'';t)a(x'';t) \\ &+ \int \mathrm{d}x'' \int \mathrm{d}x''' \Phi^{22}_{nn}(x;x';x'',x''';t)b(x'',x''';t) \\ &+ \int \mathrm{d}x'' \int_{-\infty}^{t} \mathrm{e}^{\varepsilon(t'-t)}\varphi^{21}_{nn}(x,x';x''t,t')a(x'';t')\mathrm{d}t' \\ &+ \int \mathrm{d}x'' \int \mathrm{d}x''' \int_{-\infty}^{t} \mathrm{e}^{\varepsilon(t'-t)}\varphi^{22}_{nn}(x;x';x'',x''';t,t')b(x'',x''';t')\mathrm{d}t'.\end{aligned} \tag{5.9}$$

У цих рівняннях функції

$$\Phi^{\alpha\beta}_{PP}(x,x';t) = \int \mathrm{d}\Gamma_N \hat{P}_\alpha(x)\frac{1}{q}\psi^{-1}\mathrm{i}L_N\hat{P}_\beta(x')\varrho_{\mathrm{rel}}(x^N;t) \tag{5.10}$$

описують недисипативну динаміку, а

$$\varphi^{\alpha\beta}_{I_PI_P}(x;x';t,t') = \int \mathrm{d}\Gamma_N \mathrm{i}L_N\hat{P}_\alpha(x)T(t,t')I^\beta_P(x';t')\varrho_{\mathrm{rel}}(x^N;t') \tag{5.11}$$

— кінетичні ядра переносу, які описують дисипативні процеси. Тут ми ввели позначення $\hat{P}_\alpha(x) = \{\hat{n}_1(x), \hat{n}_2(x,x')\}$. Нехтуючи двочастинковими кореляціями при $q = 1$, узагальнене кінетичне рівняння в статистиці Рені переходить у кінетичне рівняння, отримане в рамках статистики Гіббса [143], у якому ядра переносу розраховуються за допомогою релевантної функції розподілу

$\varrho_{\mathrm{rel}}(t) = \prod_{j=1}^{N}[f_1(x_j;t)/\mathrm{e}]$. У цьому випадку, нерівноважний статистичний оператор необхідно шукати як розв'язок рівняння Ліувілля з граничною умовою, що відповідає гіпотезі Боголюбова про послаблення кореляцій між частинками

$$\frac{\partial}{\partial t}\varrho(x^N;t) + \mathrm{i}L_N\varrho(x^N;t) = -\varepsilon\left(\varrho(x^N;t) - \prod_{j=1}^{N}\frac{f_1(x_j;t)}{\mathrm{e}}\right).$$

У цьому випадку отримуємо кінетичне рівняння для $\langle\hat{n}_1(x)\rangle^t$ у вигляді:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{n}_1(x)\rangle^t = \int \mathrm{d}x'\Phi_{nn}^{11}(x,x';t)a(x';t) \tag{5.12}$$

$$+\int \mathrm{d}x' \int_{-\infty}^{t} \mathrm{e}^{\varepsilon(t'-t)}\varphi_{nn}^{11}(x,x';t,t')a(x';t')\mathrm{d}t', \tag{5.13}$$

яке при $q = 1$ переходить у кінетичне рівняння статистики Гіббса [143].

5.2 Розрахунок узагальнених ядер переносу

Для більш детального вивчення структури кореляційних функцій (5.10) і ядер переносу (5.11), розглянемо дію оператора Ліувілля на $\hat{n}_1(x)$ і $\hat{n}_2(x,x')$. Його можна записати наступним чином:

$$\mathrm{i}L_N\hat{n}_1(x) = -\frac{\partial}{\partial\vec{r}}\cdot\frac{1}{m}\hat{\vec{j}}(\vec{r},\vec{p}) + \frac{\partial}{\partial\vec{p}}\cdot\hat{\vec{F}}(\vec{r},\vec{p}), \tag{5.14}$$

де

$$\hat{\vec{j}}(\vec{r},\vec{p}) = \sum_{j=1}^{N}\vec{p}_j\delta(\vec{r}-\vec{r}_j)\delta(\vec{p}-\vec{p}_j) \tag{5.15}$$

— мікроскопічна густина імпульсу у просторі координат та імпульсів, а

$$\hat{\vec{F}}(\vec{r},\vec{p}) = \sum_{l\neq j}\frac{\partial}{\partial\vec{r}_j}\Phi\left(|\vec{r}_j-\vec{r}_l|\right)\delta(\vec{r}-\vec{r}_j)\delta(\vec{p}-\vec{p}_j) \tag{5.16}$$

— мікроскопічна густина сили у просторі координат і імпульсів. Подібно,

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}L_N\hat{n}_2(x,x') &= -\frac{\partial}{\partial\vec{r}}\cdot\frac{1}{m}\hat{\vec{j}}(\vec{r},\vec{p})\hat{n}_1(x')-\hat{n}_1(x)\frac{\partial}{\partial\vec{r}'} \\
&\cdot\quad \frac{1}{m}\hat{\vec{j}}(\vec{r}',\vec{p}')+\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\cdot\hat{\vec{F}}(\vec{r},\vec{p})\hat{n}_1(x') \\
&\quad +\hat{n}_1(x)\frac{\partial}{\partial\vec{p}'}\cdot\hat{\vec{F}}(\vec{r}',\vec{p}').
\end{aligned} \tag{5.17}
$$

Приймаючи до уваги співвідношення (5.14)–(5.17), для функцій (5.10) отримаємо, зокрема,

$$
\Phi^{11}_{nn}(x,x';t)=\left[\Omega_{nj}(x,x';t)\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{r}'}-\Omega_{nF}(x,x';t)\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{p}'}\right], \tag{5.18}
$$

де

$$
\Omega_{nj}(x,x';t)=\int \mathrm{d}\Gamma_N\hat{n}_1(x)\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\hat{\vec{j}}(x')\varrho_{\mathrm{rel}}(x^N;t),
$$

$$
\Omega_{nF}(x,x';t)=\int \mathrm{d}\Gamma_N\hat{n}_1(x)\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\hat{\vec{F}}(x')\varrho_{\mathrm{rel}}(x^N;t),
$$

— часові кореляційні функції, які розраховуються з релеватною функцією розподілу $\varrho_{\mathrm{rel}}(x^N;t)$.

Узагальнені ядра переносу (5.11) можна записати наступним чином:

$$
\begin{aligned}
\varphi^{11}_{nn}(x,x';t,t') &= -\Big[\frac{\partial}{\partial\vec{r}}\cdot D_{jj}(x,x';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{r}'} \\
&\quad -\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\cdot D_{Fj}(x,x';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{r}'}-\frac{\partial}{\partial\vec{r}}\cdot D_{jF}(x,x';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{p}'} \\
&\quad +\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\cdot D_{FF}(x,x';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{p}'}\Big],
\end{aligned} \tag{5.19}
$$

$$
\begin{aligned}
&\varphi^{12}_{nn}(x,x',x'';t,t')=-\Big[\frac{\partial}{\partial\vec{r}}\cdot D_{jjn}(x,x',x'';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{r}'} \\
&+\frac{\partial}{\partial\vec{r}}\cdot D_{jnj}(x,x',x'';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{r}''}-\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\cdot D_{Fjn}(x,x',x'';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{r}'} \\
&-\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\cdot D_{Fnj}(x,x',x'';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{r}''}-\frac{\partial}{\partial\vec{r}}\cdot D_{jFn}(x,x',x'';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{p}'} \\
&-\frac{\partial}{\partial\vec{r}}\cdot D_{jnF}(x,x',x'';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{p}''}+\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\cdot D_{FFn}(x,x',x'';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{p}'} \\
&+\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\cdot D_{FnF}(x,x',x'';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{p}''}\Big],
\end{aligned} \tag{5.20}
$$

$$
\begin{aligned}
&\varphi_{nn}^{22}(x,x',x'',x''';t,t') = -\frac{\partial}{\partial\vec{r}} \qquad (5.21)\\
&\cdot\left[D_{jnjn}(x,x',x'',x''';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{r}''}+D_{jnnj}(x,x',x'',x''';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{r}'''}\right]\\
&-\frac{\partial}{\partial\vec{r}'}\\
&\cdot\left[D_{njjn}(x,x',x'',x''';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{r}''}+D_{njnj}(x,x',x'',x''';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{r}'''}\right]\\
&+\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\\
&\cdot\left[D_{Fnjn}(x,x',x'',x''';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{r}''}+D_{Fnnj}(x,x',x'',x''';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{r}'''}\right]\\
&+\frac{\partial}{\partial\vec{p}'}\\
&\cdot\left[D_{nFjn}(x,x',x'',x''';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{r}''}+D_{nFnj}(x,x',x'',x''';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{r}'''}\right]\\
&+\frac{\partial}{\partial\vec{r}}\\
&\cdot\left[D_{jnFn}(x,x',x'',x''';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{p}''}+D_{jnnF}(x,x',x'',x''';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{p}'''}\right]\\
&+\frac{\partial}{\partial\vec{r}'}\\
&\cdot\left[D_{njFn}(x,x',x'',x''';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{p}''}+D_{njnF}(x,x',x'',x''';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{p}'''}\right]\\
&-\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\\
&\cdot\left[D_{FnFn}(x,x',x'',x'';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{p}''}+D_{FnnF}(x,x',x'',x''';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{p}'''}\right]\\
&-\frac{\partial}{\partial\vec{p}'}\\
&\cdot\left[D_{nFFn}(x,x',x'',x'';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{p}''}+D_{nFnF}(x,x',x'',x''';t,t')\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{p}'''}\right],
\end{aligned}
$$

де

$$
D_{jj}(x,x';t,t') = \int \mathrm{d}\Gamma_N \hat{\vec{j}}(x)T(t,t')\left[1-P(t')\right]\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\hat{\vec{j}}(x')\varrho_{\mathrm{rel}}(x^N;t'),
$$

$$
D_{FF}(x,x';t,t') = \int \mathrm{d}\Gamma_N \hat{\vec{F}}(x)T(t,t')\left[1-P(t')\right]\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\hat{\vec{F}}(x')\varrho_{\mathrm{rel}}(x^N;t')
$$

— узагальнені коефіцієнти дифузії і тертя у просторі координат і імпульсів у рамках статистики Рені. При цьому, коли $q = 1$

$$\int \mathrm{d}\vec{p} \int \mathrm{d}\vec{p}\,' D_{jj}(x, x'; t, t') = D_{jj}(\vec{r}, \vec{r}\,'; t, t'),$$

$$\int \mathrm{d}\vec{p} \int \mathrm{d}\vec{p}\,' D_{FF}(x, x'; t, t') = D_{FF}(\vec{r}, \vec{r}\,'; t, t')$$

вони переходять в узагальнені коефіцієнти дифузії і тертя в статистиці Гіббса. Отримані кінетичні рівняння містять кореляційні функції другого, третього і четвертого порядків Ω_{nj}, Ω_{nF}, Ω_{nnj}, Ω_{nnF}, Ω_{nnjn}, Ω_{nnFn} за динамичними змінними $\hat{n}(x)$, $\hat{\vec{j}}(x)$, $\hat{\vec{F}}(x)$:

$$\Omega_{nnj}(x, x', x''; t) = \int \mathrm{d}\Gamma_N \hat{n}_1(x)\hat{n}_1(x')\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\hat{\vec{j}}(x'')\varrho_{\mathrm{rel}}(x^N; t),$$

$$\Omega_{nnF}(x, x', x''; t) = \int \mathrm{d}\Gamma_N \hat{n}_1(x)\hat{n}_1(x')\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\hat{\vec{F}}(x'')\varrho_{\mathrm{rel}}(x^N; t),$$

$$\Omega_{nnjn}(x, x', x'', x'''; t) = \int \mathrm{d}\Gamma_N \hat{n}_1(x)\hat{n}_1(x')\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\hat{\vec{j}}(x'')\hat{n}_1(x''')\varrho_{\mathrm{rel}}(x^N; t),$$

$$\Omega_{nnF}(x, x', x'', x'''; t) = \int \mathrm{d}\Gamma_N \hat{n}_1(x)\hat{n}_1(x')\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\hat{\vec{F}}(x'')\hat{n}_1(x''')\varrho_{\mathrm{rel}}(x^N; t).$$

Величини $\Omega_{\alpha\beta}$ є кореляційні функції, що описують недисипативні процеси.

Узагальнені функції пам'яті $D_{\alpha\beta}$, $D_{\alpha\beta\gamma}$ и $D_{\alpha\beta\gamma\delta}$ - це часові кореляційні функції, побудовані на динамічних змінних $\hat{n}(x)$, $\hat{\vec{j}}(x)$, $\hat{\vec{F}}(x)$, $[1 - P(t)]\,\hat{\vec{j}}(x)$, $[1 - P(t)]\hat{\vec{F}}(x)$, які описують немарковські дисипативні процеси у системі. При $q = 1$ вони переходять в функції пам'яті в статистиці Гіббса. Такі функції пам'яті як D_{njnj} и D_{nFnF} мають складну структуру

$$D_{njnj}(x, x', x'', x'''; t, t') = \int \mathrm{d}\Gamma_N \hat{n}(x)\hat{\vec{j}}(x')T(t, t')[1 - P(t')]\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\times$$

$$\times\hat{n}(x'')\hat{\vec{j}}(x''')\varrho_{\mathrm{rel}}(x^N; t'),$$

$$D_{nFnF}(x,x',x'',x''';t,t') = \int \mathrm{d}\Gamma_N \hat{n}(x)\hat{\vec{F}}(x')T(t,t')[1-P(t')]\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\times$$

$$\times\hat{n}(x'')\hat{\vec{F}}(x''')\varrho_{\mathrm{rel}}(x^N;t'),$$

тим не менше, їх можна апроксимувати, наприклад, наступним способом:

$$D_{njnj} \approx D_{nn}D_{jj} + D_{nj}D_{jn}, \qquad D_{nFnF} \approx D_{nn}D_{FF} + D_{nF}D_{Fn},$$

що відповідає ідеології теорії взаємодіючих мод.

Узагальнені кінетичні рівняння (5.8), (5.9) з врахуванням (5.18)—(5.21) мають структуру типу рівняння Фоккера-Планка. Вони можуть бути використані для переходу до рівнянь узагальненої гідродинаміки для локально збережуваних величин: густин числа частинок, їх імпульсу та енергії (5.2). Дійсно, домножаючи систему рівнянь (5.8), (5.9) на перші моменти неравноважної одночастинкової функції розподілу $f_1(\vec{r},\vec{p};t) - 1$, $\vec{p}$, $p^2/2m$ — і на $\frac{1}{2}\Phi(|\vec{r}-\vec{r}\,'|)$, отримаємо узагальнені рівняння гідродинаміки, у яких коефіцієнти узагальненої в'язкості і теплопровідності визначаються через ядра переносу з розділеними вкладами від кінетичної і потенціальної частин енергії.

У випадку розріджених газів у станах близьких до рівноваги, коли можна знехтувати нерівноважними парними кореляціями, що описуються $\langle\hat{n}_2(x,x')\rangle^t$, можна відтворити результати Богосяна [216].

Актуальним є переформулювання даного підходу для математичного моделювання дисипативних процесів у відкритих системах [218–220], дисипації і дифузії у реакціях ядерного разпаду та синтезу [220] і квантовій турбулентності [120, 217]. Для опису дисипативних процесів у відкритих квантових системах широко застосовується рівняння Ліндбланда [221–223]. Дане рівняння може бути отримано за допомогою q-узагальненого рівняння Ліувілля [187], яке ми розглянемо у наступному підрозділі.

5.3 q-Узагальнене рівняння Ліувілля

Цікаве та важливе q-узагальнення звичайного рівняння Ліувілля було запропоновано у роботі [187]:

$$\frac{\partial}{\partial t}\varrho(x^N;t) + \mathrm{i}\tilde{L}_N(t)\varrho(x^N;t) = 0, \tag{5.22}$$

де $\mathrm{i}\tilde{L}_N$ — q-параметризований оператор Ліувілля

$$\mathrm{i}\tilde{L}_N(t) = \frac{\mathrm{i}L_N}{1+(1-q)t\mathrm{i}L_N}, \tag{5.23}$$

який при $q=1$ переходить у оператор Ліувілля $\mathrm{i}L_N$. Коли $|1-q|\Omega_{\mathrm{ch}}t \ll 1$, де Ω_{ch} — характеристична частота розглядуваної фізичної системи, рівняння (5.22) можна записати у вигляді [187]:

$$\frac{\partial}{\partial t}\varrho(x^N;t) + \left[\mathrm{i}L_N - (1-q)t(\mathrm{i}L_N)^2\right]\varrho(x^N;t) = 0. \tag{5.24}$$

Це рівняння типу Ліндблада [221–223] для НСО $\varrho(x^N;t)$. Рівняння типу Ліндблада в рамках статистики Рені було отримано у роботі [166]. Розв'язок q-параметризованого рівняння Ліувілля в рамках метода НСО можна подати наступним чином:

$$\begin{aligned}
\varrho(x^N;t) &= -\varepsilon\int_{-\infty}^{t}\mathrm{e}^{\varepsilon(t'-t)}T(t,t')\varrho_{\mathrm{rel}}(x^N;t')\mathrm{d}t' \qquad (5.25)\\
&= \varrho_{\mathrm{rel}}(x^N;t) - \int_{-\infty}^{t}\mathrm{e}^{\varepsilon(t'-t)}\left[T(t,t')\frac{\partial}{\partial t'} - \int_0^1 T^{\tau}(t,t')\right.\\
&\times \left.\frac{\mathrm{i}L_N}{1+(1-q)(t'-t)\mathrm{i}L_N}T^{1-\tau}(t,t')\mathrm{d}\tau\right]\varrho_{\mathrm{rel}}(x^N;t')\mathrm{d}t',
\end{aligned}$$

де

$$T(t,t') = \exp_{+}\left\{-\int_{t'}^{t}\frac{\mathrm{i}L_N}{1+(1-q)t''\mathrm{i}L_N}\mathrm{d}t''\right\} \tag{5.26}$$

— параметризований оператор еволюції. У випадку $|1-q|\Omega_{\mathrm{ch}}t \ll 1$ із (5.25) отримаємо розв'язок рівняння типу Ліндблада для $\varrho(x^N;t)$. Цей розв'язок можна використати для отримання узагальнених рівнянь переносу для квантових систем. Зокрема, цікавим є питання про форму кінетичних рівнянь для одно- та двочастинкових нерівноважних функцій у випадку систем, які описуються НСО (5.25).

5.4 Висновки до розділу 5

Для опису кінетичних процесів у газах і рідинах далеких від рівноваги отримані нерівноважний статистичний оператор та узагальнені кінетичні рівняння для одно- та двохчастинкової функцій розподілу $f_1(x;t) = \langle\hat{n}_1(x)\rangle^t$ і $f_2(x,x';t) = \langle\hat{n}_2(x,x')\rangle^t$, використавши метод НСО Зубарєва на основі принципу максимуму ентропії Рені. Розкрито внутрішню структуру узагальнених функцій пам'яті. Це дало можливість показати, що кінетичні рівняння містять кореляційні функції другого і вищих порядків Ω_{nj}, Ω_{nF}, Ω_{nnj}, Ω_{nnF}, Ω_{nnjn}, Ω_{nnFn} за динамічними змінними $\hat{n}(x)$, $\hat{\vec{j}}(x)$, $\hat{\vec{F}}(x)$. На відміну від $\Omega_{\alpha\beta}$, що описують недисипативні процеси, дисипативні процеси в системі описуються функціями пам'яті кінетичних рівнянь $D_{\alpha\beta}$, побудованих на змінних $\hat{n}(x)$, $\hat{\vec{j}}(x)$, $\hat{\vec{F}}(x)$, $[1-P(t)]\hat{\vec{j}}(x)$ і $[1-P(t)]\hat{\vec{F}}(x)$.

Розглянули q-узагальнення рівняння Ліувілля і отримали його загальний розв'язок методом НСО. У випадку $|1-q|\Omega_{\mathrm{ch}}t \ll 1$ це дає можливість отримати розв'язок рівняння типу Ліндблада для $\varrho(x^N;t)$.

Одним із важливих питань є отримання q-узагальнених рівнянь гідродинаміки на основі рівнянь (5.8) и (5.9) і їх застосування до опису процесів турбулентності і динаміки фазових переходів у рідинах і густих газах. Актуальним також є переформулювання даного підходу для математичного моделювання квантовых систем (зокрема, квантової турбулентності [120, 217]).

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі вирішено актуальне наукове завдання - розроблення та дослідження нових математичних моделей "аномальних"дифузійних процесів у просторово-неоднорідних конденсованих системах (включаючи мультишарові наноструктури) для яких суттєва просторово-часова фрактальність. При цьому отримано такі наукові та практичні результати:

1. Із застосуванням математичного апарату фрактального числення виведено узагальнене (немарковське) рівняння дифузії у дробових похідних на основі рівняння Ліувілля у дробових похідних, запропонованого Тарасовим в методі НСО. При $q = 1$ узагальнене рівняння електродифузії в статистиці Рені переходить в узагальнене рівняння електродифузії статистики Гіббса у дробових похідних. У випадку нехтування ефектами пам'яті та просторовою неоднорідністю і коли параметр Рені $q = 1$, отримуємо відомі рівняння дифузії у дробових похідних із сталими коефіцієнтами дифузії.

2. Вперше отримано узагальнені рівняння електродифузії типу Кеттано для систем з просторово-часовою фрактальністю, які при $q = 1$, $\alpha = 1$ переходять у відомі рівняння дифузії.

3. Проведено математичне моделювання субдифузійного імпедансу та отримано якісне погодження із експериментальними дослідженнями для мультишарових наноструктур. Чисельне моделювання субдифузійного імпедансу на основі запропонованої математичної моделі дало можливість проаналізувати нелінійну природу явищ в мультишарових наноструктурах на основі частотної залежності дійсної та уявної частин її узагальненого опору.

4. Для математичного моделювання дифузійних процесів вперше отримано рівняння q- дифузії для однокомпонентної системи взаємодіючих частинок в методі НСО. Проведено числовий розрахунок просторово-часової залежності функції розсіювання та коефіцієнта q- дифузії при відповідних значеннях параметра q Рені для модельної системи. Встановлено режими суб, супер та нормальної дифузії. Показано, що часова поведінка коефіцієнта q-дифузії має від'ємну ділянку залежності, яка спостерігається на експерименті.

5. Вперше побудовано математичну модель для опису нелінійних кінетичних процесів переносу на основі узагальнених кінетичних рівнянь для нерівноважних одночастинкової та двочастинкової функцій розподілу частинок для класичних систем далеких від рівноваги, отриманих методом НСО Зубарєва у статистиці на основі ентропії Рені. Показано, що у структуру рівнянь входять узагальнені коефіцієнти дифузії і тертя частинок у просторі координат та імпульсів, що характерно для систем далеких від рівноваги.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

[1] Субмікронні та нанорозмірні структури електроніки : підручник / З. Готра, І. Григорчак, Б. Лукіянець [та ін.] ; за ред. З. Ю. Готри ; МОН України, Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича. – Чернівці : Технологічний центр, 2014. – 839 с.

[2] І. І. Григорчак Фізичні процеси та їх мікроскопічні моделі в періодичних неорганічно/органічних клатратах : [монографія] / І. І. Григорчак, П. П. Костробій, І. В. Стасюк, М. В. Токарчук, О. В. Величко, Ф. О. Іващишин, Б. М. Маркович / – Львів, Вид. Растр–7, 2015. – 285 с.

[3] Metzler R. The random walk's quide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach / Metzler R. and Klafter J. // Phys. Rep. – 2000. – V. 339., p. 1–77.

[4] Bisquert J. Theory of the electrochemical impedanse of anomalous diffusion / Bisquert J., Compte A. // J Electroanal. Chem. – 2001. – V. 499., p. 112–120.

[5] Kosztolowicz T. Hyperbolic subdiffusion impedanse / Kosztolowicz T., Lewandowska K. D. // J Phys. A: Math. Theor. – 2009. – V. 42., p. 055004(1–14).

[6] Pyanylo Ya.D. Models of mass transfer in gas transmission systems / Pyanylo Ya. D., Prytula M. G., Prytula N. M., Lopuh N. B. // Math. Model. Comp. – 2014. – V. 1., p. 84–96.

[7] Sokolowskyi Y. Mathematical modelling of non-isothermal moisture transfer and rheological behavior in cappilary-porous materials with fractal structure during drying./Sokolowskyi Y., Shymanskyi V. // Computer and Information Science. – 2014. – Vol. 7. – No 4., p. 111–122.

[8] Tarasov V. E. Fractional Dynamics: Applications of Fractional Calculus to Dynamics of Particles, Field and Media // Tarasov V. E. – New York: Springer, 2011 – 503 p.

[9] Zwanzig R. Nonequilibrium statistical mechanics. // Oxford Univ. Press, 2001. – 233 p.

[10] Резибуа П. Классическая кинетическая теория жидкостей и газов / П. Резибуа, М. де Ленер // Москва: Мир. – 1980. – 417с.

[11] Марч Н. Движение атомов жидкости / Н. Марч, М. Тоси // М.: Металлургия. – 1980. – 296с.

[12] Кайзер Дж. Статистическая термодинамика неравновесных процессов. // М.: Мир, 1990. – 608с.

[13] Balucani U. Dynamics of the Liquid State / Balucani U., Zoppi M. // Clarendon Press, Oxford. – 1994.

[14] Balescu R. Statistical dynamics Matter out of Equilibrium. // Imperial Coll. Press. – 1997.

[15] Evans D. Statistical Mechanics of Nonequilibrium Liquids / Evans D., Morriss G. // Cambridge Univer. Press. – 2008. – 328p.

[16] Чапля Є. Я. Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах / Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю. // Київ: Наукова думка, 2009. – 303 с.

[17] Gell-Mann M. Nonextensive Entropy – Interdisciplinary Applications / M. Gell-Mann, C. Tsallis // New York: Oxford University Press. – 2004. – 440p.

[18] Havrda J. H. Quantification method of classification processes. Concept of structural α-entropy / J. H. Havrda, F. Charvat // Kybernetika. – 1967. – Vol. 3. – P. 30–35.

[19] C. Tsallis (Ed.), Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics (Approaching a complex world) // Springer, New York, 2009.

[20] Turan P. Selected papers by Alfred Renyi / P. Turan. // Budapest: Akademiai Kiado, 1976. – V. 2. – 236 p.

[21] Abe S. Nonextensive Statistical Mechanics and its Applications / S. Abe, Y. Okamoto // Heidelberg: Spriger-Verlag. – 2001. – 279p.

[22] Kaniadakis G. Non Extensive Thermodynamics and Physical Applications / G. Kaniadakis, M. Lissia and A. Rapisarda (Eds.) // Physica A – 2002. – Vol. 305, No.1–2.

[23] Gell-Mann M. Nonextensive Entropy – Interdisciplinary Applications / M. Gell-Mann, C. Tsallis // New York: Oxford University Press. – 2004. – 440p.

[24] Климонтович Ю. Л. Введение в физику открытых систем / Климонтович Ю. Л. // М. : Янус. – 2002. – 284 с.

[25] Зубарев Д. Н. Статистическая механика неравновесных процессов / Д. Н. Зубарев, В. Г. Морозов, Г. Рёпке. // Москва: Физматлит, 2002. – Т. 1. – 295 с.

[26] Markiv B. B. Nonequilibrium statistical operator method in Renyi statistics / Markiv B. B., Tokarchuk R. M., Kostrobij P. P., Tokarchuk M. V. // Physica A. – 2011. – Vol. 390. – P. 785–791.

[27] Tarasov V. E. Fractional Generalization of Liouville Equations / Tarasov V. E. // Chaos, 2004. – Vol. 14 – No 1, P. 123–127.

[28] Samko S.G. Fractional Intedrals and Derivatives Theory and Applicftions/ Samko S.G., Kilbas A.A., Marichev O.I. // Gordon and Breach., New York, 1993. – 1006 p.

[29] 9. Kostrobij P. P. Generalized kinetic equations for dense gases and liquids far from equilibrium in Renyi statistics / Kostrobij P. P., Viznovych O. V., Markiv B. B., Tokarchuk M. V. // Актуальні проблеми математичної фізики та її застосувань. Збірник праць Інституту математики НАН України. – 2014. – Том 11, № 1. – С. 108–122.

[30] Kostrobij P. Generalized kinetic equations for dense gases and liquids in the Zubarev nonequilibrium statistical operator method and Renyi statistics / Kostrobij P., Viznovych O., Markiv B., Tokarchuk M. // Theoret. Math. Phys. – 2015. – Vol. 184, No. 1. – P. 1020–1032.

[31] Костробій П. П. Узагальнене рівняння дифузії в статистиці Рені / Костробій П. П., Маркович Б. М., Візнович О. В., Токарчук М. В. // Фіз.-матем. модел. інформ. техн. – 2015. – Вип. 21, № 2. – С. 117–124.

[32] Kostrobij P. P. Mathematical modeling of subdiffusion impedance in multilayer nanostructures / Kostrobij P. P., Grygorchak I. I., Ivaschyshyn F. O., Markovych B. M., Viznovych O. V., Tokarchuk M. V. // Math. Model.Comp. – 2015. – Vol. 2, No 2. – P.154–159.

[33] Костробій П. П. Субдифузійний імпеданс у мультишарових наноструктурах: експеримент, моделювання, теорія / Костробій П. П., Токарчук М. В., Григорчак І. І., Іващишин Ф. О., Маркович Б. М., Візнович О. В. // Фізичні процеси та їх мікроскопічні моделі в періодичних неорганічно/органічних клатратах : Монографія / Григорчак І. І., Костробій П. П., Стасюк І. В., Токарчук М. В., Величко О. В., Іващишин Ф. О., Маркович Б. М. – Львів, Вид. Растр – 7, 2015, – 285 с. : С. 276–285.

[34] Kostrobij P. Generalized diffusion equation with fractional derivatives within Renyi statistics / P. Kostrobij, B. Markovych, O. Viznovych, and M. Tokarchuk // J. Math. Phys. – 2016. – Vol. 57. – P. 093301.

[35] Костробій П. Узагальнене рівняння дифузії у дробових похідних у статистиці Рені / Костробій П., Маркович Б., Візнович О., Токарчук М. // Фіз.-матем. модел. інформ. техн. – 2016. – Вип. 23. – С. 108–118.

[36] Kostrobij P. Generalized electrodiffusion equation with fractality of space-time / P. Kostrobij, B. Markovych, O. Viznovych, and M. Tokarchuk // Math. Model.Comp. – 2016. – Vol. 3, No 2. – P. 163–172.

[37] Grygorchak I. I. Modification of properties of GaSe β–cyclodexterin $FeSO_4$ Clathrat by synthesis in superposed electric and light-wave fields

/ Grygorchak I. I., Ivashchyshyn F. O., Tokarchuk M. V., Pokladok N. T., Viznovych O. V. // J. Appl. Phys. – 2017. – Vol. 121. – P. 185501 (1–6).

[38] Костробій П. П., Маркович Б. М., Візнович О. В., Токарчук М. В. / Узагальнені рівняння електродифузії з просторово-часовою фрактальністю. – Львів, 2017. – 21 с. (Препринт ICMP-17-03U).

[39] Костробій П. Узагальнені кінетичні рівняння для густих газів та рідин у статистиці Рені / Візнович О., Костробій П., Марків Б., Токарчук М. // Proc. VI Internat. Conf. "Physics of Disordered Systems October 14–16, 2013,– Lviv, 2013. – P.15.

[40] Костробій П.П. Математичне моделювання субдифузійного імпедансу в електролітичних системах / Костробій П. П., Григорчак І. І., Іващишин Ф. О., Маркович Б. М., Візнович О. В., Токарчук М. В. // Науково–технічна конференція "Мікро– та нанонеоднорідні матеріали: моделі та експеримент"(INTERPOR'15). Збірник матеріалів, Львів, 22–24 вересня 2015. – Львів, 2015.– С.54–56.

[41] Костробій П.П. Узагальнене рівняння дифузії в статистиці Рені / Костробій П. П., Маркович Б. М., Візнович О. В., Токарчук М. В. // Науково–технічна конференція "Мікро– та нанонеоднорідні матеріали: моделі та експеримент"(INTERPOR'15). Збірник матеріалів. – Львів, 22–24 вересня 2015. Львів 2015. – С.57–59.

[42] Візнович О.В. Математичне моделювання аномальної дифузії / Візнович О. В. // Міжнародна міждисциплінарна наукова конференція студентів, аспірантів і молодих вчених "Science and Scientists": Збірник матеріалів, 21–22 грудня 2015. – Дніпропетровськ : Об'єднання науковців GlobalNauka, 2015. – С. 80–83.

[43] Візнович О.В. Математичне моделювання субдифузійного імпедансу у мультишарових структурах // Inżynieria i Technologia. Osiągniecia naukowe, rozwój, propozycja na rok 2015 : Zbiór artykułów naukowych, Warszawa, 30.12.2015–03.01.2016. – Warszawa, 2016. – С. 120–122.

[44] 16. Костробій П. П. До проблем математичного моделювання субдифузійного імпедансу в електролітичних системах / П. П. Костробій, Б. М. Маркович, М. В. Токарчук, О. В. Візнович // Інформатика та системні науки (ІСН–2016): матеріали VII Всеукраїнської науково-практичної конференції за міжнародною участю, м. Полтава, 10–12 березня 2016 р. – Полтава : ПУЕТ, 2016. – С. 163.

[45] Костробій П. П. Узагальнене рівняння дифузії у дробових похідних в статистиці Рені / Костробій П. П., Візнович О. В. // 16-та Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених із статистичної фізики та теорії конденсованої речовини / Інститут фізики конденсованих систем НАН України, м. Львів, 9–10 червня 2016р. – Львів, 2016. – С. 32.

[46] Kostrobij P. P. / Generalized diffusion equation in the fractional derivatives in Renyi statistics / P. P. Kostrobij, B. M. Markovych, M. V. Tokarchuk, O. V. Viznovych // Bogolyubov Conference on Problems of Theoretical Physics dedicated to the 50th anniversary of the Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of the NAS of Ukraine, Kyiv, May 24 – 26, 2016. – Kyiv, 2016. – P. 53.

[47] Костробій П. Узагальнені рівняння електродифузії з просторово-часовою фрактальністю / Костробій П., Маркович Б., Візнович О., Токарчук М. // Прикладні задачі та IT-технології :. Матеріали міжвузівського наукового семінару, присвяченого 100-річчю від дня народження професора Василя Павловича Рубаника (1917-1993) і 55-річчю кафедри прикладної математики та інформаційних технологій, Чернівці, 9–10 червня 2017. – Чернівці : Яворський С. Н., 2017. – С. 58–59.

[48] Kostrobij P. P. Generalized diffusion equation with fractional derivatives within Renyi statistics / P. P. Kostrobij, B. M. Markovych, O. V. Viznovych, M. V. Tokarchuk // XIV Міжнародна конференція "Функціональні та наноструктуровані матеріали"(FNMA'2017) і VII Міжнародна конференція "Фізика невпорядкованих систем"(PDS'2017), Львів, 25–29 вересня 2017р. – Львів, 2017. – С. 86.

[49] Tarasov V. E. Fractional Liouville and BBGKI Equations / Tarasov V. E. // J. Phys. : Conf. Ser.– 2005. – Vol. 7. – P. 17–33.

[50] Tarasov V.E. Fractional Systems and Fractional Hierarchy Equations / Tarasov V. E. // Phys. Rev. E. – 2005. – Vol. 71. – P. 011102.

[51] Hobbic R. K. Intermediate Physics for Medicine and Biology / Hobbic R. K., and Roth B. J. // New York: Springer. – 2007.

[52] Учайкин В.В. Метод дробных производних / Учайкин В. В. // Ульяновск. Изд. "Артишок". – 2008. – 512 С.

[53] Sahimi M. Non-linear and non-local transport procesess in heterogeneous media: from long-range correlated percolation to fracture and materials breakdawn / Sahimi M. // Phys. Rep. – 1998. – Vol. 306, № 4., P. 213–395.

[54] Korosak D. Fractional calculus applied to the analysis of spectral electrical conductivity of clay-water system / Korosak D., Cvikl B., Kramer J, Jecl R., Prapotnik A. // J. Contain. Hydrol. – 2007. – Vol.92. – P. 1–9.

[55] Kosztolowicz T. Measuring subdiffusion paramiters / Kosztolowicz T., Dworecki K., and Mrowczynski S. // Phys. Rev. E. – 2005. – V. 71., P. 041105 (1–11).

[56] Kosztolowicz T. Subdiffusive random walk in a membrane system. The genralized method of images approach / Kosztolowicz T. // arXiv: 1505.05199v [cond-mat.stat-mech]. – 2015. – P. 22.

[57] Bisquert J. Doubling exponent models for analysis of porous film electrodes by impedance: Relaxation of TiO2 nanoporous in equeous solution / Bisquert J., Garcia-Belmonte G., Fabregat-Santiago F., Noemi S., Bogdanoff P., Ernesto C. // J Phys. Chem.B. – 2000. – Vol. 104. – P. 2287–2298.

[58] Hilfer R. Fractional Dynamics, Irreversibulity and Ergodicity Breaking / Hilfer R. // Chaos Solutions, Fractals. – 1995. – Vol. 5, No 8. – P. 1475–1484.

[59] Hilfer R. Fractional Diffusion based on Riemann-Liouville Fractional Derivatives / Hilfer R. // J. Phys. Chem. B. – 2000. – Vol. 104. – P. 3914.

[60] Hilfer R. Fractional Time Evolution. Applications of Fractional Calculus in Physics / Hilfer R. // World Sci, Singapore. – 2000. – P. 81–130.

[61] Berkovich B. Theory of anomalous chemical transport in random fracture networks / Berkovich B., Scher H. // Phys. Rev. E. – 1998. – Vol. 57., P. 5858–5898.

[62] Bouchaud J. P. Anomalous diffusion in disordered media: statistical mechanisms, models and physical applications / Bouchaud J. P., Georges A. // Phys. Rep. – 1990. – Vol. 195. – P. 127–293.

[63] Balescu R. Anomalous transport in turbulent plasmas and continuous time random walks / Balescu R. // Phys. Rev. E. – 1995. – Vol. 51. – P. 4807–4822.

[64] Tribeche M. Charging of a dust particle in a plasma with a non extensive electron distribution function / Tribeche M., Shukla H. // Phys. Plasmas. – 2011. – Vol. 18. – P. 103702(1–4).

[65] Jindyu G. Dust charging processes in the nonequilibrium dsty plasma in nonextensive power-law distribution / Jindyu G., Du J. // arXiv: 1202.0636. – arxiv.org. – 16 P.

[66] Carreras B. A. Anomalous diffusion and exit time distributon of particle tracers in plasma turbulence model / Carreras B. A., Lynch V. E., Zaslavsky G. M. // Phys. Plasmas. – 2001. – Vol. 8. – P. 5096–5103.

[67] Tarasov V. E. Electromagnetic field of fractal distribution of charged particles / Tarasov V. E. // Phys. Plasmas. – 2005. – Vol. 12. – P. 082106.

[68] Tarasov V. E. Magnetohydrodynamics of fractal media / Tarasov V. E. // Phys. Plasmas. – 2006. – Vol. 13. – P. 052107.

[69] Монин А. С. Уравнения турбулентной дифузии / Монин А. С.// ДАН СССР, сер. геофиз. – 1955. – № 2. – С. 256–259.

[70] Zaslavsky G. M. Chaos, fractional kinetics, and anomalous transport / Zaslavsky G. M.// Phys. Rep. – 2002. – Vol. 371. – P. 461–580.

[71] Zaslavsky G. M. Fractional kinetic equation for Hamiltonian chaos / Zaslavsky G. M. // Physica D. – 1994 – Vol. 76/ – P. 110–122.

[72] Saichev A. I. Fractional kinetic equations: solutions and applications / Saichev A. I., Zaslavsky G. M. // Chaos. – 1997 – Vol. 7. – P. 753–764.

[73] Zaslavsky G. M. Fractional kinetic equation from pseudochaotic dynamics to Maxwell's demon / Zaslavsky G. M., Edelman M. A. // Physica D. – 2004. – Vol. 193. – P. 128–147.

[74] Nigmatullin R. R. Fractional kinetic equation and universal decoupling of a memory function in mesoscale region / Nigmatullin R. R. // Physica A. – 2006. – Vol. 363. – P. 282–298.

[75] Chechkin A. V. Fractional kinetics for relaxation and superdiffusion in magnetic field / Chechkin A. V., Gonchar V. Yu., Szydlovsky M. // Phys. Plasmas. – 2002. – Vol. 9. P. 78–88.

[76] Gafiychuk V. V. Stability analysis and oscillatory structures in time-fractional reaction-diffusion systems / Gafiychuk V. V., Datsko B. Y. // Phys. Rev. E. – 2007. – Vol. 75. – P. 055201(1–4).

[77] Kosztolowicz T. Time evolution of the reaction front in a subdiffusion system / Kosztolowicz T., Lewandowska K. D. // Phys. Rev. E. – 2008. – Vol. 78. – P. 066103(1–11).

[78] Шкилев В. П. Субдиффузия смешанного происхождения с химическими реакциями / Шкилев В. П. // ЖЭТФ. – 2013. – Т. 144. С. 1210–1215.

[79] Laskin N. Fractals and quantum mechanics / Laskin N. // Chaos. – 2000. – Vol. 10, – P. 780–790.

[80] Laskin N. Fractional quantum mechanics / Laskin N. // Phys. Rev. E. – 2000. – Vol. 62. – P. 3135–3145.

[81] Laskin N. Fractional quantum mechanics and Levy path integrals / Laskin N. // Phys. Lett. – 2000. – Vol. 268. – P. 298–305.

[82] Laskin N. Fractional Schrodinger equation /Laskin N. // Phys. Rev. E. – 2002. – Vol. 66. P. 056108.

[83] Naber M. Time fractional Schrodinger equation / Naber M. // J. Math. Phys. – 2004. – Vol. 45. – P. 3339–3352.

[84] Сибатов Р. Т. Дробно дифференциальный подход к описанию дисперсионного переносса в полупроводниках / Сибатов Р. Т., Учайкин В. В. // Усп. физ. наук. – 2009. – Том 179, № 10. – С. 1079–1109.

[85] Учайкин В. В. Дробно-дифференциальная феноменология аномальной диффузии космических лучей / Учайкин В. В. // Усп. физ. наук. – 2013. – Т. 183, № 1. – С. 1177–1223.

[86] Oldham K. B. Fractional Calculus. Theory and Applications of Differentiation and Integration to Arbitrary Order / Oldham K. B., Spanier J. // Math. Sci. Eng.,(Academic Press, New York). 1974. – Vol. 111.

[87] Podlubny I. Fractional Differential Equations: An Introduction to Fractional Derivatives, Fractional Differential Equations, to Methods of Their Solution and Some of Their Applications / I. Podlubny, V. T. E. Kenneth // Mathematics in Science and Engineering 198. — 1st edition. — Academic Press. – 1998.

[88] O'Shaughnessy B. Analytical solutions for diffusion on fractal objects / O'Shaughnessy B., Procaccia I. // Phys. Rev. Lett, – 1985. – V.54. – P. 544–1675.

[89] Mandelbrot B. B. The Fractal Geometry of Nuture / Mandelbrot B. B. // New York: Freeman. – 1983. – 498 P.

[90] Metzler R.Deriving fractional Fokker-Plank equations from a generalized master equation / Metzler R., Barkai E., and Klafter J. // Eurphys. Lett. – 1999. – Vol. 46. – P. 431–436.

[91] Essex C. Tsallis and Renyi entropies in fractional diffusion and entropy production / Essex C., Schulzky C., Franz A., Hoffmann K. H. // Physica A. – 2000. – Vol. 284. – P. 299–308.

[92] Abe S. Nonextensive Statistical Mechanics and its Applications / S. Abe and Y. Okamoto // Heidelberg, Spriger–Verlag. – 2001.

[93] Gell-Mann M. Nonextensive Entropy – Interdisciplinary Applications / M. Gell-Mann and C. Tsallis // New York, Oxford Univ. Press. – 2004.

[94] Vasconcellos A. R. Statistical approach to non–Fickian diffusion / Vasconcellos A. R., Ramos J. G., Gorenstein A., Klienke M. U., Souza Cruz T. G., and Lizzi R // Inter. J. Mod. Phys. B. – 2006. – V. 20. – No 28. – P. 4821–4841.

[95] Учайкин В. В. Аномальная диффузия и дробно-устойчивые распределения / Учайкин В. В. // ЖЭТФ. – 2003. – Т. 124. – Вып. 4(10). – С. 903–920.

[96] Станиславский А. А. Вероятностная интерпретация интеграла дробного порядка / Станиславский А. А. // Теор. Мат. Физ. – 2004.– Т. 138, No 3. – С. 491–507.

[97] Nigmatullin R. R. To the Theoretical Explanation of the “Universal Response” / R. R. Nigmatullin // physica status solidi (b). – 1984. – Vol. 123, – No. 2. – P. 739–745.

[98] Nigmatullin R. R. On the Theory of Relaxation for Systems with “Remnant” Memory/ R. R. Nigmatullin // physica status solidi (b). – 1984. – V. 124, – No. 1, P. 389–393.

[99] Nigmatullin R. R. The realization of the generalized transfer equation in a medium with fractal geometry / R. R. Nigmatullin // physica status solidi (b). – 1986. – Vol. 133, – No. 1, P. 425–430.

[100] Nigmatullin R. R. Fractional integral and its physical interpretation / R. R. Nigmatullin // Theoretical and Mathematical Physics. – 1992. – Vol. 90, – No. 3, P. 242–251.

[101] Nigmatullin R. R. Cole-Davidson dielectric relaxation as a self-similar relaxation process / R. R. Nigmatullin, Y. E. Ryabov // Physics of the Solid State. – 1997. – Vol. 39, –No. 1, P. 87–90.

[102] Nigmatullin R. R. Dielectric relaxation phenomenon based on the fractional kinetics: theory and its experimental confirmation / R. R. Nigmatullin // Physica Scripta. – 2009. – Vol. 136. – P. 014001.

[103] Khamzin A. A. Microscopic model of a non-debye dielectric relaxation: The Cole-Cole law and its generalization / A. A. Khamzin, R. R. Nigmatullin, I. I. Popov // Theoretical and Mathematical Physics. – 2012. – Vol. 173, – No. 2, P. 1604–1619.

[104] Popov I. I. The generalized Jonscher's relationship for conductivity and its confirmation for porous structures / I. I. Popov, R. R. Nigmatullin, E. Y. Koroleva, A. A. Nabereznov // Journal of Non-Crystalline Solids. – 2012. – Vol. 358, – No. 1, P. 1–7.

[105] Nigmatullin R. 'Fractional' kinetic equations and 'universal' decoupling of a memory function in mesoscale region / R. Nigmatullin // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. – 2006. – Vol. 363, – No. 2. – P. 282–298.

[106] Tarasov V. E. Fractional Statistical Mechanics / Tarasov V. E. // Chaos. – 2006. – Vol. 16. – P. 033108(1–16).

[107] Tarasov V. E. Transport Equations from Liouville Equations for Fractional Systems / Tarasov V. E. // Int. J Mod. Phys. B. – 2006. – Vol. 20, No 3. – P. 341–354.

[108] Tarasov V. E. Fractional diffusion equations for open quantum system / Tarasov V. E. // Nonlinear Dyn. – 2013. – Vol. 71. – P. 663–670.

[109] Tarasov V. E. Fractional Heisenberg Equation / Tarasov V. E. // Phys. Lett. A. – 2006. – Vol. 372. – P. 2984–2988.

[110] Tarasov V. E. Fractional Hydrodynamic Equations for fractal Media / Tarasov V. E. // Annals Phys. – 2006. – Vol. 318, No 2. – P. 256–307.

[111] Tarasov V. E. Liouville and Bogoliubov Equations with Fractional Derivatives / Tarasov V. E. // Modern. Phys. Lett. B. – 2007. – Vol. 21. – P. 237–248.

[112] Tarasov V. E. The Fractional Chapman–Kolmogorov Equation / Tarasov V. E. // Modern. Phys. Lett. B. – 2007. – Vol. 21. – P. 163–174.

[113] Тарасов В. Е. Дробное обобщение квантового марковского управляющего уравнения / Тарасов В. Е. // Теор.мат.физ. – 2009 – Том 158, No 2. – С. 214–233.

[114] Tarasov V. E. Quantym dissipation from power–law memory / Tarasov V. E. // Annals Phys. – 2012. – Vol. 327. – P. 1719–1729.

[115] Tarasov V. E. Power–law Spatial Dispersion from Fractional Liouville Equations / Tarasov V. E. // arXiv: 1307. – 4930v1. – 2013. – P. 18.

[116] Kobelev L. Ya. The Multifractal Time and Irreversibility in Dynamic Systems / Kobelev L. Ya. // arXiv: physics / 0002002v1. – 2000. – 4p.

[117] Kobelev Ya. L. Kinetic Equations for Large Systems with Fractal Structuresm / Kobelev Ya. L., Kobelev L. Ya., and Romanov E. P. // Dokl. Phys. – 2000. – Vol. 45, No 5. – P. 194–197.

[118] Kobelev Ya. L. Description of Diffusion in Fractal Media on the Basis of the Klimontovich Kinetic Equation in Fractal Space / Kobelev Ya. L., Kobelev L. Ya., Kobelev V. L., and Romanov E. P. // Dokl. Phys. – 2002. – Vol. 47, No 8. – P. 580–582.

[119] Lukashchuk S. Yu. Time-fractional extensions of the Liouville and Zwanzig equations / Lukashchuk S. Yu. // Cent. E ur. J. Phys. – 2013. – Vol. 11(6). – P. 740–749.

[120] Yoshida K. Inertial-range structure of Gross-Pitaevskii turbulence within a spectral closure approximation / Yoshida K., Arimitsu T. // J. Phys. A: Math. Theor. – 2013. – Vol. 46. – 335501(1–15).

[121] Valente P. C. The non-equilibrium region of grid-generated decaying turbulence/ Valente P. C., Vassilicos J. C. // J. Fluid. Mech. – 2014. – Vol. 744. – P. 5–37.

[122] Valente P. C. The energe cascage grid-generated non-equilibrium decaying turbulence / Valente P. C., Vassilicos J. C. // Phys. Fluid. – 2015. – Vol. 27(4). – P. 045103(1–28).

[123] Tokuyama M. Statistical-mechanical theory of nonlinear density fluctuations near the glass transition / Tokuyama M. // Physica A. – 2014. – Vol. 395. – P. 31–47.

[124] Mendoza-Mendez P. Generalized Langevin equation for tracer diffusion in atomic liquids / Mendoza-Mendez P., Lopez-Flores L., Vizcarra-Redon A., Sanchez-Diaz L. F., Medina-Noyola M. // Physica A. 2014. – Vol. 394. – P. 1–16.

[125] Du J. Transition state theory: A generalization to nonequilibrium systems with power-law distributions / Du J. // Physica A. – 2012. – Vol. 391. – P. 1718–1728.

[126] Guo R. Are power-law distributions an equilibrium distribution or a stationary nonequilibrium distribution / Guo R., Du J. // Physica A. – 2014. – Vol. 406. – P. 281–286.

[127] Boon J. P. Microscopic approach to nonlinear reaction-diffusion: The case of morphogen gradient formation / Boon J. P., Lutsko J. F., Lutsko C. // Phys. Rev. E. – 2012. – Vol. 85, No 2. – P. 0211126.

[128] Mazenko G. F. Fundamental theory of statistical particle dynamics / Mazenko G. F. // Phys. Rev. E. 2010. – Vol. 81, No 6. – P. 061102.

[129] Mazenko G. F. Smoluchowski dynamics and the ergotic-nonergotic transition / Mazenko G. F. // Phys. Rev. E. 2011. – Vol. 83, No 4. – P. 041125.

[130] Das S. P. Field theoretic formulation of kinetic theory: basic development / Das S. P., Mazenko G. F. // J. Stat. Phys. – 2012. – Vol. 149, No 4. – P. 643–675.

[131] Kostrobij P. Zubarev nonequilibrium statistical operator method in Renyi statistics. Reaction-diffusion processes / Kostrobij P., Tokarchuk R., Tokarchuk M., Markiv B. // Conden. Matter Phys. – 2014. – Vol. 17, No 3. – P. 33005(1–9).

[132] Hlushak P.A. Quantum transport equations for Bose systems taking into account nonlinear hydrodynamics processes / Hlushak P. A., Tokarchuk M. V. // Conden. Matter Phys. – 2014. – Vol. 17, No 2. – P. 23606(1–14).

[133] Silva C. A. B. Generalized Kinetic Equation for Far–from–Equilibrium Many–Body Systems/ Silva C. A. B., Vasconcellos A. R., Ramos J. G., Luzzi R. // J. Stat. Phys. – 2011. – Vol. 143, No 5. – P. 1020–1034.

[134] Silva C. A. B. Higher–order generalized hydrodynamics: Foundations within a nonequilibrium statistical ensemble formation / Silva C. A. B., Ramos J. G., Vasconcellos A. R., Luzzi R. // Phys. Rev. E. – 2015. – Vol. 91, No 6. – P. 063011.

[135] Tsytovich V. N. Kinetic theory of dusty plasmas: V. The hydrodynamics equations / Tsytovich V. N., de Andelis U. // Phys. Plasmas. – 2004. – Vol. 11, No 2. – P. 496–506.

[136] Olemskoi A. I. Theory of Structure Transitions in Non-Equilibrium Condensed Matter / A. I. Olemskoi // New York: Nova Science. – 1999. – 285 P.

[137] Frank T. D. Nonlinear Fokker-Planck Equations. Fundamentals and Applications // Springer, 2004. 404p.

[138] Boon J. Molecular Hydrodynamics / Boon J., Yip S. // New-York: McGraw-Hill Inc. – 1980. – 417 P.

[139] Мрыглод И.М. К статистической гидродинамике простых жидкостей / И. М. Мрыглод, М. В. Токарчук // Вопр. атом. науки и техн. – 1992. – No. 3(24). – С. 134–139.

[140] Mryglod I.M. Generalized collective modes for the Lennard-Jones fluid / I. M. Mryglod, I. P. Omelyan, M. V. Tokarchuk // Mol. Phys. – 1995. – Vol. 84, No. 2. – P. 235–259.

[141] Markiv B. B. Relaxation to the state of molecular hydrodynamics in the generalized hydrodynamics of liquids / Markiv B. B., Omelyan I. P., Tokarchuk M. V. // Phys. Rev. E. – 2010. – Vol. 82. – P. 041202:1–11.

[142] Зубарев Д.Н. Обьединение кинетического и гидродинамического подходов в теории плотных газов и жидкостей / Д. Н. Зубарев, В. Г. Морозов, И. П. Омелян, М. В. Токарчук // ТМФ. – 1993. – Том. 96, No. 3. – С. 325–350.

[143] Tokarchuk M. V. A consistent description of kinetics and hydrodynamics of systems of interacting particles by means of the nonequilibrium statistical operator method / M. V. Tokarchuk, I. P. Omelyan, A. E. Kobryn // Condens. Matter Phys. – 1998. – Vol. 1, No. 4(16). – P. 687–751.

[144] Kobryn A. E. The modified group expansions for constructions of solutions to the BBGKY hierarchy / A. E. Kobryn, I. P. Omelyan, M. V. Tokarchuk // J. Stat. Phys. – 1998. – Vol. 92, No. 5/6. – P. 973–994.

[145] Markiv B. Consistent description of kinetics and hydrodynamics of weakly nonequilibrium processes in simple liquids / Markiv B., Omelyan I., Tokarchuk M. // J. Stat. Phys., 2014, Vol. 155. – P. 843–866.

[146] Markiv B. Consistent description of kinetics and hydrodynamics of dusty plasma / B. Markiv, M. Tokarchuk // Phys. Plasmas. – 2014. – Vol. 21. – P. 023707: 1–16.

[147] Зубарев Д. Н. Неравновесная статистическая термодинамика / Д. Н. Зубарев. // Москва: Наука. – 1971. – С. 415.

[148] Зубарев Д. Н. Статистическая механика неравновесных процессов / Д. Н. Зубарев, В. Г. Морозов, Г. Рёпке // Москва: Физматлит. – 2002. – Том 2. – 260 с.

[149] Cercignani C. Many-Particle Dynamics and Kinetic Equations / Cercignani C., Gerasimenko V. I., Petryna D. Ya. // Kluwer. Acad. Publ. – 1997.

[150] Kostrobij P. P. Reaction-diffusion processes in the "metal-gas" systems / P. P. Kostrobij, Tokarchuk M. V., B. M. Markovych, V. V. Ignatyuk, B. V. Gnativ // Publishing House of National University "Lviv Polytechnic". – Lviv. – 2009 (in Ukrainian).

[151] Tsallis C. Possible Generalization of Boltzmann-Gibbs Statistics / C. Tsallis // J. Stat. Phys. – 1988. – Vol. 52, No 1/2. – P. 479–489.

[152] Renyi A. Probability theory / A. Renyi // Amsterdam: North-Holland. – 1970. – 670p.

[153] Sharma B. D. New nonadditive measures of entropy for discrete probability distributions / Sharma B. D., and Mittal D. P. // J. Math. Sci. – 1975. – Vol. 10. – P. 28–40.

[154] Akturk E. Is Sharma-Mittal entropy really a step beyond Tsallis and Renyi entropies / Akturk E., Bagci G. B., and Sever R. // arXiv preprint cond–mat/0703277. – 2007. – 9p.

[155] Beck C. Thermodynamics of Chaotic Systems / C. Beck, F. Schlogl. – Cambridge: Cambridge University Press. – 1993. – 308 p.

[156] Beck C. Superstatistics: theory and applications / Beck C. // Continuum mechanics and thermodynamics. – 2004. – Vol. 16. – P. 293–304.

[157] Beck C. In: Anomalous Transport: Foundations and Applications / R. Klages, G Radons, I. M. Sokolov (Eds.), Wiley-VCH, New York. – 2008. – Chap. 15.

[158] Bak P. How Nuture Works. The Science of Self-Organized Criticality / P. Bak. // Berlin: Springer. – 1996. – 212p.

[159] Зубарев Д. Н. Современные методы статистической теории неравновесных процессов / Д. Н. Зубарев // Итоги науки и техники. Современные проблемы математики. – Москва : ВИНИТИ. – 1980. – Том 157. – С. 131–226.

[160] Abe S. Nonextensive Statistical Mechanics and its Applications / Abe S., Okamoto Y. (Eds.) // Spriger-Verlag, Heidelbergю. – 2001.

[161] Gell-Mann M. Nonextensive Entropy – Interdisciplinary Applications / M. Gell-Mann, C. Tsallis. // New York: Oxford University Press. – 2004. – 440p.

[162] Boon I. P. Generalized diffusion equation / Boon I. P., Lutsko J. F.// Physica A. – 2006. – Vol. 368. – P. 55–62.

[163] Arimitsu T. Analysis of fully developed turbulence in terms of Tsallis / T. Arimitsu, N. Arimitsu // Phys. Rev. E. – 2000. – Vol. 61, No. 3. – P. 3227–3240.

[164] Ramos F. M. Non-extensive statistics and three-dimensional fully developed turbulence / Ramos F. M., Rosa R. R., Neto C. R., Bolzan M. J., Sa L. D. A., Velho H. F. C. // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. – 2001. – Vol. 295(1)., P. 250–253.

[165] Bezerra J. R. Transport coefficients and nonextensive statistics / J. R. Bezerra, R. Silva, J. A. S. Lima // Physica A. – 2003. – Vol. 322. – P. 256–266.

[166] Kirchanov V. S. Using the Renyi entropy to describe quantum dissipative systems in statistical mechanics / V. S. Kirchanov // Teor. Math. Phys. – 2008. – Vol. 156, No. 3. – P. 1347–1355.

[167] Feng Z-H. Energy fluctuation and correlation in Tsallis statistics / Z.-H. Feng, L.-Y. Liu // Physica A. – 2010. – Vol. 389. – P. 237–241.

[168] Du J. Nonextensivity in nonequilibrium plasma systems with Coulombian long-range interactions / Du J. // Physics Letters A. – 2004. – Vol. 329.4. – P. 262–267.

[169] Du J.L. Jeans' criterion in nonextensive statistical mechanics / J. L. Du // Physica A. – 2004. – Vol. 335. – P. 107–114.

[170] Yulmetyev R.M. Intensity approximation of random fluctuation in complex systems / R. M. Yulmetyev, F. M. Gafarov, D. G. Yulmetyeva, N. A. Emeljanova // Physica A. – 2002. – Vol. 303. – P. 427–438.

[171] Yulmetyev R. M. Dynamical Shannon entropy and information Tsallis entropy in complex systems / R. M. Yulmetyev, N. A. Emeljanova, F. M. Gafarov // Physica A. – 2004. – Vol. 341. – P. 649–676.

[172] Plastino A. R. A nonextensive maximum entropy approach to a family of nonlinear reaction–diffusion equations / Plastino A. R., CasaM. s, and Plastino A. // Physica A. – 2000. – Vol. 280.3. – P. 289–303.

[173] Niven R. K. Q-exponential structure of arbitrary-order reaction kinetics / Niven R. K. // Chemical engineering science. – 2006. – Vol. 61.11. – P. 3785–3790.

[174] Baggi G. B. Nonextensive reaction rate / Baggi G. B. // Physica A. – 2007. – Vol. 386.1. – P. 79–84.

[175] Essex C. Tsallis and Renyi entropies in fractional diffusion and entropy production / Essex C., Schulzky C., Franz A., Hoffmann K. H. // Physica A. – 2000 – Vol. 284. – P. 299–308.

[176] Bashkirov A. G. Information entropy and power-law distributions for chaotic systems / Bashkirov A. G., and Vityazev A. V. // Physica A. – 2000. – Vol. 277.1. – P. 136–145.

[177] Башкиров А. Г. Энтропия Реньи как статистическая энтропия сложных систем / А. Г. Башкиров // ТМФ. – 2006. – Том 149, No 2. – С. 299–317.

[178] Jizba P. The world according to Renyi: thermodenamics of multifracnal sestems / P. Jizba, T. Arimitsu // Ann. Phys. – 2004. – Vol. 312. – P. 17–59.

[179] Башкиров А. Г. Функция распределения для подсистемы, испытывающей флуктуации температры / А. Г. Башкиров, А. Д. Суханов // ЖЭТФ. – 2002. – Том 122, No. 3(9). – С. 513–520.

[180] Bashkirov A. G. On maximum entropy principle, superstatistics, power– law distribution and Renyi parameter / A. G. Bashkirov // Physica A. – 2004. – Vol. 340. – P. 153–162.

[181] Bashkirov A. G. Maximum Renyi Entropy Principle for Systems with Power–Law Hamiltonians / A. G. Bashkirov // Phys. Rev. Lett. – 2004. – Vol. 93, No 13. – P. 130601:1–4.

[182] Parvan A. S. Extensive Renyi statistics from non-extensive entropy / A. S. Parvan, T. S. Biro // Phys. Lett. A. – 2005. – Vol. 340. – P. 375–387.

[183] Parvan A. S. Renyi statistics in equlibrium statistical mechanics / A. S. Parvan, T. S. Biro // Phys. Lett. A. – 2010. – Vol. 374. – P. 1951-–1957.

[184] Figueiredo A. On the statistical interpretation of generalized entropies / Figueiredo A., Amato M. A., and Filho M. T. R. // Physica A. – 2006. – Vol. 367. – P. 191–206.

[185] Luzzi R. Non-equilibrium statistical mechanics of complex systems: An overview / Luzzi R., Vasconcellos A. R., and Ramos J. G. // Nuovo Cimento Rivista Serie. – 2007. – Vol. 30.3. – P.95.

[186] Vasconcellos A. R. Statistical Approach to Non-Fickian Diffusion / Vasconcellos A. R., Ramos J. G., Gorenstein A., Kleinke M. U., Souza Cruz M. U., Luzzi R. // International Journal of Modern Physics B. – 2006. – Vol. 20.28. – P. 4821–4841.

[187] Vidiella–Barranco A. Nonextensive approach to decoherence in quantum mechanics / Vidiella–Barranco A., and Moya-Cessa H. // Physics Letters A. – 2001. – Vol. 279.1. – P. 56–60.

[188] Milburn G. J. Intrinsic decoherence in quantum mechanics/ Milburn G. J. // Physical Review A. – 1991. – Vol. 44.9. – P. 5401.

[189] Bonifacio R. Model-independent approach to nondissipative decoherence / Bonifacio R., Olivares S., Tombesi P., Vitali D. // Physical Review A. – 2000. – Vol. 61.5. – P. 053802.

[190] Kaniadakis G. Non-linear kinetics underlying generalized statistics / Kaniadakis G. // Physica A. – 2001. – Vol. 296.3. – P. 405–425.

[191] Borland L. Microscopic dynamics of the nonlinear Fokker–Planck equation: A phenomenological model / Borland L. // Physical Review E. – 1998. – Vol. 57.6. – P. 6634.

[192] Климонтович Ю. Л. Статистическая теория открытых систем / Ю. Л. Климонтович // Москва: Янус. – 1995. – 622с.

[193] Rajagopal A. K. Implications of form invariance to the structure of nonextensive entropies / A. K. Rajagopal, S. Abe // Phys. Rev. Lett. – 1999. – Vol. 83. – P. 1711–1714.

[194] Abe S. Microcanonical foundation for systems with power-law distributions / S. Abe, A. K. Rajagopal // J. Phys. A. – 2000. – Vol. 33., P. 8733–8738.

[195] Lesche B. Renyi entropies and observables / B. Lesche // Phys. Rev. E. – 2004. – Vol. 70, No. 1. – P. 017102:1–4.

[196] Abe S. Stability of Tsallis entropy and instabilities of Renyi and normalized Tsallis entropies: A basis for q-exponential distributions / S. Abe // Phys. Rev. E. – 2002. – Vol. 66, No. 4. – P. 046134:1–6.

[197] Abe S. Necessity of q- expectation value in nonextensive statistical mechanics / S. Abe, G. B. Bagci // Phys. Rev. E. – 2005. – Vol. 71, No. 1. – P. 016139:1–5.

[198] Боголюбов Н. Н. Проблемы динамической теории в статистической физике / Н. Н. Боголюбов. – Москва–Ленинград: Гостехиздат. – 1946.

[199] Стойнов З. Б. Электрохимический импеданс / Стойнов З. Б., Графов Б. М. и др. // М: Наука. – 1991. – 336с.

[200] Barsoukov E. Impedance spectroscopy. Theory, experiment and application / Eds.: E. Barsoukov, J. R. Macdonald // Canada: Wiley interscience. – 2005. – 585p.

[201] Григорчак І. І. Імпедансна спектроскопія / Григорчак І. І., Понеділок Г. В. // Львів: Видав. НУ "Львівська політехніка". – 2011. – 352c.

[202] Bertoluzzi L. Theory of Impedance Spectroscopy of Ambipolar Solar Cells with Trap Mediated Recombination / Bertoluzzi L., Boix P. P., Mora-Sero I., Bisquert J. // J. Phys. Chem. C. – 2014. – Vol. 118. – P. 16574–16580.

[203] Bisquert J. Theory of Impedance and Capacitance Spectroscopy of Solar Cells with Dielectric Relaxation, Drift-Diffusion Transport and Recombination / Bisquert J., Bertoluzzi L., Carcia-Belmonte G., Mora-Sero I. // J Phys. Chem. C. – 2014. – Vol. 118 – P. 18983–18991.

[204] Bertoluzzi L. Charge transfer processes at the semiconductor/electrolyte interface for solar fuels production: insight from impedance spectroscopy / Bertoluzzi L., Lopez Varo P., Tejada J. A. J., Bisquert J. // J Mater. Chem. A. – 2015 (in press).

[205] Umeda M., Dokko K., at all Electrochemical impendance study of Li-ion insertion into mesocarbon microbead single particle electrode (Part 1. Graphitized carbon) // Electrochim. – 47. 2001. – P. 885–890.

[206] Hjeim A-K. Experimental and theoretical analysis of LiMn2O4 cathodes for use in rechargeable lithium batteries by electrochemical impendance spectroscopy (EIS) / Hjeim A-K. Lindbergh G. // Electrochim. Acta, 47. 2002. – P. 1747–1759.

[207] Bishchaniuk T.M. Semiconductor clathrates-cavitand complex with a fractal quest system / Bishchaniuk T. M., Grygorchak I. I., Ivashchyshyn F. O. // Phys. Suf. Eng. – 2014. – Vol. 12, No 3. – P. 360–371.

[208] Звіт про науково-дослідну роботу “Фізичні процеси і їх математичне моделювання у наногібридизованих структурах пристроїв сенсорики і на-

копичення енергії” (ДБ/ФПМ, кер. НДР Костробій П. П.), Національний університет “Львівська політехніка”. – Львів. – 2014. – 130с.

[209] Compter A. The generalized Cattaneo equation for the description of anomalous transport processes / Compter A.,and Metzler R. // J. Phys. A: Math.Gen. – 1997. – Vol. 30. – P. 7277–7289.

[210] Metzler R. The restaurant at the end of the random walk: recent developments in the description of anomalous transport by fractional dynamics / Metzler R. and Klafter J. // J. Phys. A: Math. Gen. – 2004. – Vol. 37. – P. R161–R208.

[211] Bisquert J. Fractional Diffusion in the Multiple-Trapping Regime and Revision of the Equivalence with the Continuos-Time Random Walk.// Phys. Rev. Lett. – 2003. – Vol. 91, No 1. – P. 010602(1–4).

[212] Bisquert J. Interpretation of a fractional diffusion equation with nonconserved probability density in terms of experimental systems with trapping or recombination // Phys. Rev. E. – 2005. – Vol. 72. – P. 011109(1–6).

[213] Kosztoiowicz T. How to Measure Subdiffusion Parameters / Kosztoiowicz T., Dworecki K., and Mrowczynski S. // Phys. Rev. Lett. – 2005. – Vol. 94. – P. 170602(1–4).

[214] Kant R. Theory of Anomalous Diffusion Impedance of Realistic Fractal Electrode / Kant R., Kumar R., and Yadav V. K. // J. Phys. Chem. C. – 2008. – Vol. 112. – P. 4019–4023.

[215] Рехвиашвили С. Ш. Модель диффузионно-дрейфового транспорта носителей заряда в слоях с фрактальной структурой / Рехвиашвили С. Ш., Мамчуев М. О., Мамчуев М. О. // Физ. твер. тела. – 2016. – Том 58. – Вып. 4. – С. 763–766.

[216] Boghosian B. M. Navier-Stokes equations for generalized thermostatistics / Boghosian B. M. // Brazilian journal of physics. – 1999. – Vol. 29, No 1. – P. 91–107.

[217] Nemirovskii S. K. Quantum turbulence: Theoretical and numerical problems / Nemirovskii S. K. // Physics Reports. – 2013. – Vol. 524, No.3. – P. 85–202.

[218] Менский М. Б. Диссипация и декогеренция квантовых систем / Менский М. Б. // Усп. физ. наук. – 2003. – Том 173, № 11. – С. 1199–1219.

[219] Schaller G. Non-equilibrium Master Equations (Berlin: Tech. Univ.). – 2014. – 104p.

[220] Sargsyan V. V. Application of the theory of open quantum systems to nuclear physics problems / Sargsyan V. V., Kanokov Z., Adamian G. G., Antonenko N. V. // Physic. Part. and Nucl. – 2016. – Vol. 47, No 2. – P. 157–205. **41** 297 (in Russian).

[221] Lindblad G. On the generators of quantum dynamical semigroups / Lindblad G. // Communications in Mathematical Physics. – 1976. – Vol. 48, No 2. – P. 119–130.

[222] Dekker H. Classical and quantum mechanics of the damped harmonic oscillator / Dekker H. // Physics Reports. – 1981. – Vol. 80, No 1. – P. 1–110.

[223] Isar A. Open quantum systems / Isar A., Sandulescu A., Scutaru H., Stefanescu E., Scheid W. // International Journal of Modern Physics E. – 1994. – Vol. 3, No 02. – P. 635–714.

[224] Lesnicki D. Molecular Hydrodynamics from Memory Kernels / Lesnicki D., and Vuilleumier R., Carof A., and Rotenberg B. // Phys. Rev. Letters. – 2016. – Vol. 116, No 14. – P. 147804(1-5).

[225] Chtchelkatchev N. M. Complex singularities of fluids avtocorrelation function / Chtchelkatchev N. M., Ryltsev R. E. // Pis'ma v ZhETF. – 2015. – Vol. 102. – iss. 10. – P. 732-738.

[226] Chtchelkatchev N. M. Singularity band of velocity auto correlation function of Lennard-Jones fluid in complex ω-plain / Chtchelkatchev N. M., Ryltsev R. E. // arXiv preprint arXiv:1507.04532 – 2015. – 9p.

[227] Cottrill-Shepherd K. Fractional differential forms/ Cottrill-Shepherd K., and Naber M. // J. Math. Phys. – 2001. – Vol. 42. – P. 2203–2212.

[228] Mainardi F. Fractional culculus. In book: Fractal and Fractional Culculus in Continuum Mechanics / A. Carprinteri and F. Mainardi // Springer Vienna. Vienna. – 1997. – P. 291–348.

[229] Caputo M. A new dissipation model based on memory mechanism / Caputo M., and Mainardi F. // Pure Appl. Geophys. – 1971. – Vol. 91. – P. 134–147.

[230] Qi H. Solutions of the space-time fractional Cattaneo diffusion equation / H. Qi, X. Jiang // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. – 2011. – Vol. 390, No. 11. – P. 1876–1883.

[231] Sun H. Fractional differential models for anomalous diffusion / H. Sun, W. Chen, C. Li, Y. Chen // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. – 2010. – Vol. 389, No. 14. – P. 2719–2724.

[232] Гончарук В. Є. Математичні моделі та експериментальні дані про поширення радіонуклідів у грунтах / Гончарук В. Є, Лянце Г. Т., Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю. // Львів: Растр-7, – 2014. – 243с.

ДОДАТОК А

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:

1. Костробій П. П. Узагальнене рівняння дифузії в статистиці Рені / Костробій П. П., Маркович Б. М., Візнович О. В., Токарчук М. В. // Фіз.-матем. модел. інформ. техн. – 2015. – Вип. 21, № 2. – С. 117–124.

2. Kostrobij P. P. Mathematical modeling of subdiffusion impedance in multilayer nanostructures / Kostrobij P. P., Grygorchak I. I., Ivaschyshyn F. O., Markovych B. M., Viznovych O. V., Tokarchuk M. V. // Math. Model. Comp. – 2015. – Vol. 2, No 2. – P. 154-159.

3. Костробій П. Узагальнене рівняння дифузії у дробових похідних у статистиці Рені / Костробій П., Маркович Б., Візнович О., Токарчук М. // Фіз.-матем. модел. інформ. техн. – 2016. – Вип. 23. – С. 108–118.

4. Kostrobij P. Generalized electrodiffusion equation with fractality of space-time / P. Kostrobij, B. Markovych, O. Viznovych, M. Tokarchuk // Math. Model. Comp. – 2016. – Vol. 3, No 2. – P. 163–172.

5. Kostrobij P. Generalized kinetic equations for dense gases and liquids in the Zubarev nonequilibrium statistical operator method and Renyi statistics / Kostrobij P., Viznovych O., Markiv B., Tokarchuk M. // Theoret. Math. Phys. – 2015. – Vol. 184, No. 1. – P. 1020–1032.

6. Kostrobij P. Generalized diffusion equation with fractional derivatives within Renyi statistics / P. Kostrobij, B. Markovych, O. Viznovych, M. Tokarchuk // J. Math. Phys. – 2016. – Vol. 57. – P. 093301.

7. Grygorchak I. I. Modification of properties of GaSe β–cyclodexterin $FeSO_4$ clathrat by synthesis in superposed electric and light-wave fields / Grygorchak I. I., Ivashchyshyn F. O., Tokarchuk M. V., Pokladok N. T., Viznovych O. V. // J. Appl. Phys. – 2017. – Vol. 121. – P. 185501(1–6).

8. Kostrobij P. P. Generalized kinetic equations for dense gases and liquids far from equilibrium in Renyi statistics / Kostrobij P. P., Viznovych O. V., Markiv B. B., Tokarchuk M. V. // Актуальні проблеми математичної фізики та її застосувань. Збірник праць Інституту математики НАН України. – 2014. – Том 11, № 1. – С. 108–122.

9. Костробій П. П. Субдифузійний імпеданс у мультишарових наноструктурах: експеримент, моделювання, теорія / Костробій П. П., Токарчук М. В., Григорчак І. І., Іващишин Ф. О., Маркович Б. М., Візнович О. В. // Фізичні процеси та їх мікроскопічні моделі в періодичних неорганічно/органічних клатратах : Монографія / Григорчак І. І., Костробій П. П., Стасюк І. В., Токарчук М. В., Величко О. В., Іващишин Ф. О., Маркович Б. М. – Львів : Вид. Растр-7, 2015. – С. 276–285.

10. Костробій П. П., Маркович Б. М., Візнович О. В., Токарчук М. В. / Узагальнені рівняння електродифузії з просторово-часовою фрактальністю. – Львів, 2017. – 21 с. (Препринт ICMP–17–03U).

11. Візнович О. Узагальнені кінетичні рівняння для густих газів та рідин у статистиці Рені / Візнович О., Костробій П., Марків Б., Токарчук М. // Proc. VI Intern. Conf. "Physics of Disordered Systems October 14–16, 2013. – Lviv, 2013. – P. 15.

12. Костробій П. П. Математичне моделювання субдифузійного імпедансу в електролітичних системах / Костробій П. П., Григорчак І. І., Іващишин Ф. О., Маркович Б. М., Візнович О. В., Токарчук М. В. // Науково-технічна конференція "Мікро– та нанонеоднорідні матеріали: моделі та експеримент"(INTERPOR'15). Збірник матеріалів, Львів, 22–24 вересня 2015. – Львів, 2015. – С. 54–56.

13. Костробій П. П. Узагальнене рівняння дифузії в статистиці Рені / Ко-

стробій П. П., Маркович Б. М., Візнович О. В., Токарчук М. В. // Науково–технічна конференція "Мікро– та нанонеоднорідні матеріали: моделі та експеримент"(INTERPOR'15). Збірник матеріалів. – Львів, 22-24 вересня 2015. – Львів, 2015. – С. 57–59.

14. Візнович О. В. Математичне моделювання аномальної дифузії / Візнович О. В. // Міжнародна міждисциплінарна наукова конференція студентів, аспірантів і молодих вчених "Science and Scientists": Збірник матеріалів, 21–22 грудня 2015. – Дніпропетровськ : Об'єднання науковців GlobalNauka, 2015. – С. 80–83.

15. Візнович О.В. Математичне моделювання субдифузійного імпедансу у мультишарових наноструктурах / Візнович О.В. // Inżynieria i Technologia. Osiągniecia naukowe, rozwój, propozycja na rok 2015: Zbiór artykułow naukowych, – Warszawa, 30.12.2015–03.01.2016. – Warszawa, 2016. – С. 120–122.

16. Костробій П. П. До проблем математичного моделювання субдифузійного імпедансу в електролітичних системах / П. П. Костробій, Б. М. Маркович, М. В. Токарчук, О. В. Візнович // Інформатика та системні науки (ІСН–2016): матеріали VII Всеукраїнської науково–практичної конференції за міжнародною участю, м. Полтава, 10–12 березня 2016 р. – Полтава: ПУЕТ, 2016. – С. 163.

17. Костробій П. П. Узагальнене рівняння дифузії у дробових похідних в статистиці Рені / Костробій П. П., Візнович О. В. // 16–та Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених із статистичної фізики та теорії конденсованої речовини / Інститут фізики конденсованих систем НАН України, м. Львів, 9–10 червня 2016р. – Львів, 2016. – С. 32.

18. Kostrobij P. P. / Generalized diffusion equation in the fractional derivatives in Renyi statistics / P. P. Kostrobij, B. M. Markovych, M. V. Tokarchuk, O. V. Viznovych // Bogolyubov Conference on Problems of Theoretical Physics dedicated to the 50th anniversary of the Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of the NAS of Ukraine, Kyiv, May 24 – 26, 2016. – Kyiv, 2016. – P. 53.

19. Костробій П. Узагальнені рівняння електродифузії з просторово–часовою фрактальністю / Костробій П., Маркович Б., Візнович О., Токарчук М. // Прикладні задачі та IT-технології:. Матеріали міжвузівського наукового семінару, присвяченого 100–річчю від дня народження професора Василя Павловича Рубаника (1917–1993) і 55–річчю кафедри прикладної математики та інформаційних технологій, Чернівці, 9–10 червня 2017. – Чернівці: Яворський С. Н., 2017. – С. 58–59.

20. Kostrobij P. P. Generalized diffusion equation with fractional derivatives within Renyi statistics / P. P. Kostrobij, B. M. Markovych, O. V. Viznovych, M. V. Tokarchuk // XIV Міжнародна конференція "Функціональні та наноструктуровані матеріали"(FNMA'2017) і VII Міжнародна конференція "Фізика невпорядкованих систем"(PDS'2017), Львів, 25–29 вересня 2017р. – Львів, 2017. – С. 86.

Матеріали дисертаційної роботи доповідались і обговорювались на конференціях:

Результати дисертаційної роботи доповідались і опубліковані в матеріалах таких наукових конференцій: VI Intern. Conf. "Physics of disordered systems"(Lviv, 2013); Наук.-техн. конф. "Мікро- та нанонеоднорідні матеріали: моделі та експеримент"(INTERPOR'15) (Львів, 2015); Міжнар. міждисциплінарній наук. конф. студентів, аспірантів і молодих вчених "Science and Scientists"(Дніпропетровськ, 2015); Konf. Międzynar. Nauk.-Prakt. "Inżynieria i Technologia. Osiągnięcia Naukowe, Rozwój, Propozycje na rok 2015"(Warszawa, 2015); VII Всеукр. наук.-практ. конф. за міжнар. участю "Інформатика та системні науки"(ІСН–2016) (Полтава, 2016); 16-й Всеукр. школі-самінарі та Конкурсі молодих вчених із статистичної фізики та теорії конденсованої речовини Інституту фізики конденсованих систем НАН України (Львів, 2016); Bogolyubov Conf. on Problems of Theoretical Physics dedicated to the 50th anniversary of the Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of the NAS of Ukraine (Kyiv, 2016); Міжвузівському наук. семінарі, присвяченому 100-річчю від дня народження проф. Василя Павловича Рубаника (1917–1993) і 55-річчю кафедри прикладної математики та інформаційних технологій "Прикладні задачі та IT-технології"(Чернівці, 2017); XIV Міжнар. конф. "Функціональні та наноструктуровані матеріали"(FNMA'2017) і VII Міжнар. конф. "Фізика невпорядкованих систем"(PDS'2017) (Львів, 2017). Робота проходила апробацію на регулярних наукових семінарах кафедри прикладної математики Національного університету "Львівська політехніка"(2012–2017).

ДОДАТОК Б

Довідки про використання результатів дисертаційного дослідження

Товариство з обмеженою відповідальністю
“БЕСКИД БІТ”

Львів, в. Городоцька 85/21, р/р N 26007239964001 ЗГРУ “Приватбанк” м. Львова, МФО 325321, ЗКПО 23959001, т/ф: (032): 242-15-49, ІПН 239590013046, № свід. 17847336

«ЗАТВЕРДЖУЮ»
Директор ТзОВ
«Бескид-Біт»
____________М.І. Турко
«02» жовтня 2017 р.

Товариство з обмеженою відповідальністю Бескид Біт № 23959001 Україна • Львів

АКТ
про використання результатів дисертаційної роботи
асистента кафедри прикладної математики Національного
університету «Львівська політехніка» Візнович Олександри Василівни

Даний акт укладено про те, що в ТзОВ «Бескид-біт» використано низку результатів дисертаційної роботи асистента кафедри прикладної математики Національного університету «Львівська політехніка» Візнович Олександри Василівни. Зокрема, використано наступне:

- математичні моделі та підходи до аналізу процесів електродифузії в шаруватих напівпровідникових структурах;
- програмну технологію розрахунку коефіцієнтів дифузіїв у випадку субдифузійної дифузії в кристалах з шаруватою структурою.

Використання розроблених Візнович О.В. математичних моделей та програмних продуктів дало можливість проаналізувати деякі результати дифузійних процесів в шаруватих кристалах та розробити нові технології виробництва сенсорів на їх основі.

Заступник директора
з наукової роботи / Ю.Ігнатьєв/

ІСКРА ISKRA

ПРИВАТНЕ АКЦІОНЕРНЕ ТОВАРИСТВО "ЛЬВІВСЬКИЙ ЕЛЕКТРОЛАМПОВИЙ ЗАВОД "ІСКРА"

Приватне акціонерне товариство

"Львівський електроламповий завод "ІСКРА"

Україна, 79066, м. Львів, вул. Вулецька, 14
тел. +38 (032) 270 40 96
факс +38 (032) 221 91 66
e-mail: Office@iskra.com.ua

№ 254 від 03 листопада 2017 р.

«ЗАТВЕРДЖУЮ»
«03» листопада 2017 р.

АКТ

про використання результатів дисертаційної роботи асистента кафедри прикладної математики Національного університету «Львівська політехніка» Візнович Олександри Василівни

Даний акт укладено про те, що в ПрАТ «Львівський електроламповий завод «Іскра» використано ряд результатів дисертаційної роботи асистента кафедри прикладної математики Національного університету «Львівська політехніка» Візнович Олександри Василівни.

Зокрема для удосконалення технології виробництва освітлювальних приладів на основі світлодіодних пристроїв використано результати дослідження коефіцієнтів дифузії та моделей субдифузії.

Використання отриманих Візнович О.В. розрахункових формул та алгоритмів розрахунку дало можливість удосконалити деякі складові технологічного процесу виробництва світлодіодних джерел освітлення.

Генеральний директор,
кандидат економічних наук — Костів М.А.

ТОВАРИСТВО "ЛЬВІВСЬКИЙ ЕЛЕКТРОЛАМПОВИЙ ЗАВОД "ІСКРА" УКРАЇНА ВІДДІЛ ПО РОБОТІ З ПЕРСОНАЛОМ № 00214344

«Затверджую»
Проректор з науково-педагогічної роботи
Національного університету
«Львівська політехніка»
__________ Давидчак О.Р.
«03» листопада 2017р.

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ "ЛЬВІВСЬКА ПОЛІТЕХНІКА" ЗКПО 02071010

А К Т

про впровадження результатів кандидатської дисертаційної роботи асистента Візнович Олександри Василівни на тему «Математичне моделювання дифузійних процесів в рамках статистики Рені» у навчальний процес на кафедрі прикладної математики Національного університету «Львівська політехніка»

Даним актом засвідчується, що наукові та практичні результати дисертаційної роботи асистента кафедри прикладної математики Візнович О.В. на тему «Математичне моделювання дифузійних процесів в рамках статистики Рені» впроваджено у навчальний процес кафедри прикладної математики Національного університету «Львівська політехніка», а саме:

- вивід рівнянь переносу у дробових похідних на основі методу нерівноважного статистичного оператора використано в лекційному курсі «Стохастичні моделі систем» для студентів другого (магістерського) рівня вищої освіти (спеціальність 113 – «Прикладна математика», освітньо-наукова програма «Прикладна математика») у таких темах:
  - тема №2: Процеси дифузійного переносу;
  - тема №4:Система рівнянь збереження для швидких та повільних потоків;
  - тема №5: Турбулентність;

- математичний підхід отримання рівнянь дифузії у дробових похідних та побудова функцій розподілу для випадкових змінних на основі ентропії Рені використано у лекційному курсі «Випадкові процеси» для студентів 4-го курсу освітньо-кваліфікаційного рівня «бакалавр» (спеціальність 6.040301 – «Прикладна математика») у такій темі:
  - тема №5: Процеси Маркова.

Розроблений Візнович О.В. підхід виводу рівнянь переносу у дробових похідних на основі методу нерівноважного статистичного оператора дає студентам можливість: оволодіти основними підходами побудови узагальнених рівнянь переносу, зокрема дифузійних процесів; вивчити основні принципи побудови узагальнених рівнянь переносу на основі математичних стохастичних моделей опису випадкових процесів у фізико-хімічних та біологічних системах. Також розроблений математичний підхід отримання рівнянь дифузії у дробових похідних та побудова функцій розподілу для випадкових змінних на основі ентропії Рені дають студентам можливість: оволодіти основними підходами до моделювання випадкових процесів; вивчити сучасні принципи побудови функцій розподілу для випадкових змінних; ознайомитись з основними поняттями ентропії систем.

Лектор курсів
докт. фіз.-мат.наук, проф. М.В. Токарчук

Завідувача кафедри
прикладної математики, П.П. Костробій
докт. фіз.-мат.наук, проф.

Директор
Інституту прикладної математики та П.І. Каленюк
фундаментальних наук,
докт. фіз.-мат. наук, проф.