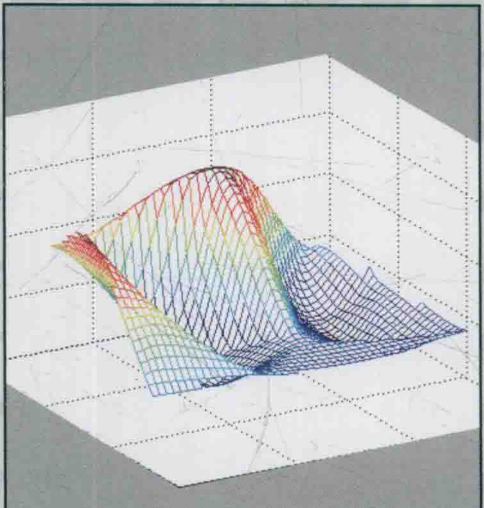
反常扩散的分数阶微分方程和统计模型

陈文　孙洪广　等　著



科学出版社

反常扩散的分数阶微分方程和统计模型

陈　文　孙洪广　等　著

科学出版社
北　京

内 容 简 介

反常扩散或反常运移现象在环境、水文、海洋、生物等领域广泛存在，是一类不服从经典 Fick 第二定律的扩散现象。本书主要讲述反常扩散相关研究基础，介绍两种反常扩散的理论模型及其应用，包括分数阶导数扩散方程模型的理论基础、物理机理、数值算法；反常扩散统计描述涉及的非常规统计方法和随机行走模型等。在工程应用方面，本书主要讲述反常扩散模型在地下含水层溶质迁移过程模拟、水工建筑物混凝土氯离子侵蚀，非饱和土壤水分运移过程分析与其他领域的应用。本书涵盖了反常扩散的基本知识、建模手段、数值算法、工程应用、研究热点和最新进展。

本书可作为高等院校力学、环境科学、物理、水文和岩土等专业的研究生选修课教材或教学参考书，也可以作为水利、土木、生物、数学、交通、采矿类领域的有关研究人员的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

反常扩散的分数阶微分方程和统计模型/陈文等著. —北京：科学出版社，2017

ISBN 978-7-03-051565-0

Ⅰ. ①反… Ⅱ. ①陈… Ⅲ. ①积分微分方程–统计模型 Ⅳ. ①O175.6

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2017) 第 016732 号

责任编辑：童安齐 / 责任校对：陶丽萍
责任印制：吕春珉 / 封面设计：耕者设计工作室

科学出版社 出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码：100717
http://www.sciencep.com

三河市骏杰印刷有限公司 印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销
*
2017 年 2 月第 一 版 开本：B5 (720 × 1000)
2017 年 2 月第一次印刷 印张：14
字数：270 000

定价：80.00 元

(如有印装质量问题，我社负责调换〈骏杰〉)
销售部电话 010-62136230 编辑部电话 010-62130750

前　言

扩散是自然界中广泛存在的物理过程，具有悠久的研究历史，是一个既古老又新兴的研究课题。但是由于扩散介质的复杂性，特别是非均匀性和各向异性，大多数扩散过程不服从经典的 Fick 第二定律，应该称为反常扩散。反常扩散或反常运移是物理、环境、水文、生物、气象等学科重要的研究课题，从物理上讲，这类扩散过程不能使用标准的统计物理方法来描述。具体的反常扩散现象包括地下含水层溶质迁移、土壤中水分或污染物扩散、湍流涡运动、药物控释、神经信号传输、固体废弃物渗透、核废料深层渗漏等。

我们在已出版的《力学与工程问题的分数阶导数建模》(科学出版社，2011 年) 一书中，已经简要介绍了反常扩散过程的分数阶导数建模与统计描述。本书是在已有内容的基础上进行扩展和补充，作者希望通过本书能够使读者较全面地了解反常扩散建模、数值算法和应用方面的知识和前沿，在此基础上获得新思路和灵感，促进反常扩散研究的发展。

本书关注复杂介质中水和溶质的扩散规律及其应用。复杂介质中水的扩散和运移规律是环境、气象和生物等领域关心的主要课题之一，其重要性体现在下列两个方面：第一，水分的扩散和运移直接影响地球的水循环、生物对水分的吸收、地下水的利用等；第二，水分扩散和运移过程直接影响水中溶质的扩散和运移，它是溶质扩散和运移研究的基础课题之一。量化描述污染物或各种溶质粒子在复杂介质中的时空分布特征和迁移规律可以为污染控制、环境和生态保护提供理论依据。反常扩散研究将有助于准确预测土壤与地下水的污染程度，评估污染物对土壤或地下含水层的长期环境影响，进而为土壤和地下水污染的治理提供依据。反常扩散的研究成果也可以直接应用于解决其他的环境问题，例如，海水入侵、核废料处理、烂尾矿、混凝土腐蚀等。反常扩散的研究与分数阶布朗运动直接相关，在理论上，反常扩散的研究也对深入理解分数阶布朗运动与涨落理论具有重要的价值，因而反常扩散也是力学与物理学的一个重要理论研究课题。同时热传导、药物控释、生物大分子运动和半导体导电研究等许多问题实际上都涉及反常扩散过程，本书的研究成果也同样适用。

反常扩散的研究手段主要包括确定性微分方程模型和统计物理方法。本书主要介绍分数阶导数扩散方程模型来量化分析复杂介质中的扩散过程，讲解反常扩散相关研究基础，分数阶扩散模型的基本概念。分数阶导数的数学定义是由一个卷积积分表示的，从物理上来讲，时间分数阶导数描述过程相关的物理现象，称为历

史依赖性；空间分数阶导数描述物理过程的路径依赖和全域相关特征，称为全域依赖性。因此，分数阶导数扩散方程模型可以描述各类反常扩散过程，特别是扩散行为的历史依赖性、路径依赖性和非局域性。在点源条件下，反常扩散过程中位移统计二阶矩与时间的关系呈幂指数关系，也可以由此得到统计幂指数与分数阶导数模型阶数之间的量化关系。同时，由反常扩散的统计描述也可以得到统计模型方法，本书主要讲述反常扩散涉及的非常规统计方法和随机行走模型。

反常扩散的研究成果在多个领域有广泛的应用，本书主要讲述理论成果在环境和水文领域的应用，具体包括地下含水层溶质迁移过程模拟以得到准确预测土壤与地下水的污染程度，评估污染物对土壤或地下含水层的长期环境影响，同时讲述反常扩散模型在水工建筑物混凝土氯离子侵蚀、非饱和土壤水分运移过程分析、河流泥沙运动及其他领域的应用。

本书的内容主要来源于作者及其研究团队在反常扩散研究方面的研究积累和学术见解，其中主要涉及的科学问题的研究源于与课题组承担的反常扩散课题相关的国家自然科学基金项目 (项目编号：11572111，11572112，11528205，41628202)、国家杰出青年基金项目 (项目编号：11125208)、“111” 引智计划项目 (项目编号：B12032) 等。参加本书部分工作的课题组成员包括庞国飞、韦慧、张建军、梁英杰、危嵩、蔡伟、许政、刘肖廷、常爱莲、胡帅、黑鑫东；其他课题组成员在本书的写作过程中提供了素材及许多宝贵的修改意见，同时还得到许多同仁的热心帮助；张勇教授对本书的撰写工作提出了宝贵的修改建议，作者在此一并致谢。

由于作者水平所限，书中不足之处在所难免，热忱欢迎同行们和广大读者批评指正。

陈　文

2016 年 10 月于南京

目　录

前言

第一章　绪论 ······ 1

1.1　反常扩散的定义 ······ 1

1.2　自然界和工程中的反常扩散现象 ······ 1

1.3　研究历史与现状 ······ 2

1.3.1　反常扩散建模与应用 ······ 2

1.3.2　反常扩散的数值模拟方法 ······ 6

第二章　反常扩散建模概述 ······ 9

2.1　反常扩散物理基础 ······ 9

2.2　非线性扩散模型 ······ 9

2.2.1　非线性模型 I ······ 9

2.2.2　非线性模型 II ······ 10

2.3　变系数扩散模型 ······ 10

2.3.1　考虑扩散系数时间依赖性的模型 ······ 10

2.3.2　考虑边界条件时间依赖性的模型 ······ 11

2.4　随机行走模型 ······ 12

2.5　分数阶扩散模型 ······ 12

第三章　分数阶扩散模型基础 ······ 14

3.1　分数阶导数与分形导数 ······ 14

3.1.1　分数阶微积分的定义 ······ 15

3.1.2　分数阶微积分的性质 ······ 16

3.1.3　变阶与随机阶积分和导数的定义、分形导数定义 ······ 17

3.1.4　分形导数的定义 ······ 19

3.2　分数阶 Fick 定律、微分方程模型及其统计表示 ······ 19

3.3　多尺度反常扩散建模 ······ 23

3.3.1　分布式导数扩散模型 ······ 23

3.3.2　数值算例与讨论 ······ 25

3.4　分数阶导数模型与分形导数模型的比较 ······ 28

3.4.1　理论分析 ······ 28

3.4.2　数值算例 ······ 30

3.4.3 小结 ······ 32
第四章 变导数反常扩散模型 ······ 33
4.1 变导数研究简介 ······ 33
4.2 变导数反常扩散模型的分类与应用分析 ······ 33
4.2.1 时间依赖形式的变导数模型 ······ 34
4.2.2 空间依赖形式的变导数模型 ······ 36
4.2.3 浓度依赖形式的变导数模型 ······ 37
4.2.4 系统参数依赖形式的变导数模型 ······ 38
4.2.5 变导数反常扩散模型的统计特征 ······ 39
4.2.6 讨论 ······ 41
4.3 模糊系统观点 ······ 41
4.3.1 问题的提出 ······ 41
4.3.2 模糊分数阶系统 ······ 42
4.3.3 算例分析 ······ 44
4.4 随机导数模型 ······ 46
4.4.1 研究意义 ······ 46
4.4.2 随机导数耗散模型 ······ 47
4.4.3 随机导数反常扩散模型 ······ 50
4.4.4 随机导数模型的统计特性及其应用 ······ 51
4.4.5 讨论 ······ 54
第五章 分数阶导数方程模型的反问题 ······ 56
5.1 反问题简述 ······ 56
5.1.1 反问题的求解 ······ 57
5.1.2 分数阶导数方程的五类反问题 ······ 58
5.1.3 小结 ······ 62
5.2 参数反问题 ······ 62
5.2.1 Levenberg-Marquardt 算法求解 ······ 62
5.2.2 参数反演问题的同伦算法 ······ 68
5.2.3 数值算例 ······ 71
5.2.4 小结 ······ 73
5.3 最佳摄动法求解源项反问题 ······ 73
5.3.1 源项反问题 ······ 74
5.3.2 最佳摄动量法 ······ 76
5.3.3 数值算例 ······ 78

第六章　分数阶反常扩散方程的计算方法 …… 81
6.1　分数阶反常扩散方程的算法简介 …… 81
6.2　一些分数阶反常扩散方程的解析解 …… 81
6.2.1　Mittag-Leffler 函数简介 …… 81
6.2.2　分数阶耗散模型的解析解 …… 82
6.2.3　分数阶扩散模型的解析解 …… 83
6.3　时间分数阶反常扩散方程的有限差分算法 …… 84
6.4　基于有限单元法的时间分数阶反常扩散方程半解析算法 …… 86
6.4.1　算法框架 …… 87
6.4.2　数值算例 …… 90
6.4.3　讨论 …… 96
6.4.4　小结 …… 97
6.5　空间分数阶反常扩散方程的有限单元法 …… 97
6.5.1　模型描述 …… 98
6.5.2　变分形式 …… 99
6.5.3　有限元求解 …… 99
6.5.4　数值算例 …… 102
6.5.5　问题与讨论 …… 105
6.5.6　附录 …… 106
第七章　反常扩散的非常规统计建模方法 …… 110
7.1　Lévy 稳定分布 …… 110
7.1.1　Lévy 稳定分布的特征函数 …… 111
7.1.2　Lévy 稳定分布的密度函数和稳定分布函数 …… 112
7.1.3　Lévy 稳定分布的随机数 …… 117
7.1.4　Lévy 稳定分布的参数估计 …… 118
7.2　扩展 Gaussian 分布 …… 121
7.3　Tsallis 分布 …… 122
7.3.1　Tsallis 熵的引入 …… 122
7.3.2　Tsallis 熵的非广延性 …… 123
7.3.3　Tsallis 熵与广义微分算子的关系 …… 123
7.3.4　Tsallis 分布 …… 124
7.4　Mittag-Leffler 分布 …… 125
7.4.1　Mittag-Leffler 函数 …… 125
7.4.2　单参数的 Mittag-Leffler 分布 …… 127
7.4.3　双参数的 Mittag-Leffler 分布 …… 127

7.4.4 Mittag-Leffler 随机数的生成 …… 128
7.5 Lévy 稳定分布 Matlab 工具箱 …… 129
7.5.1 建模功能模块 …… 130
7.5.2 图形界面功能模块 …… 133
第八章 随机行走模型 …… 136
8.1 连续时间随机行走模型 …… 136
8.1.1 连续随机行走模型理论基础 …… 136
8.1.2 随机行走模型的蒙特卡洛模拟 …… 138
8.2 分形结构介质中的反常扩散 …… 139
8.2.1 研究背景 …… 139
8.2.2 分形介质扩散基本概念 …… 139
8.2.3 分形结构构造 …… 141
8.2.4 分形结构中的随机行走 …… 142
8.2.5 分形结构中的随机行走模型参数确定 …… 152
第九章 流体力学和水文中的反常扩散 …… 156
9.1 分数阶扩散模型在地下含水层溶质迁移过程模拟中的应用 …… 156
9.2 水工建筑物混凝土氯离子侵蚀 …… 159
9.2.1 混凝土中氯离子扩散模型 …… 160
9.2.2 时间分数阶扩散方程中的参数获得 …… 161
9.2.3 结果与讨论 …… 162
9.2.4 小结 …… 165
9.3 分形导数 Richards 模型在非饱和土壤水分运移过程研究中的应用 …… 166
9.3.1 模型描述 …… 166
9.3.2 讨论 …… 171
9.3.3 小结 …… 172
9.4 分数阶扩散模型在水流含沙量垂向分布研究中的应用 …… 172
9.4.1 模型描述 …… 172
9.4.2 实验数据分析 …… 174
9.4.3 讨论 …… 178
第十章 反常扩散在其他领域中的应用 …… 180
10.1 量子物理中的反常扩散 …… 180
10.1.1 薛定谔方程 …… 180
10.1.2 空间分数阶薛定谔方程 …… 181
10.1.3 时间分数阶薛定谔方程 …… 181
10.1.4 分数阶薛定谔方程的相关变换 …… 182

10.1.5 国内外其他研究进展 ······ 183
10.2 生物流体力学中的反常扩散现象 ······ 184
10.2.1 生物渗流力学中的反常扩散 ······ 184
10.2.2 心肌细胞内钙火花反常扩散 ······ 184
10.2.3 药物控释反常扩散 ······ 185
10.2.4 多孔介质干燥过程中湿分的反常扩散 ······ 185
10.3 复杂介质中的反常热传导过程分析 ······ 186
10.3.1 非傅里叶热传导 ······ 187
10.3.2 多孔介质中传热传质现象 ······ 188
第十一章 结论与展望 ······ 190
11.1 结论 ······ 190
11.2 研究展望 ······ 191
参考文献 ······ 192

第一章　绪　论

1.1　反常扩散的定义

反常扩散是指不能由统计物理的标准方法来描述的一类非平衡过程[1]。从微观上讲，由于传输介质的复杂性，粒子的随机运动受到了不规则介质结构的限制，其运动不能由均匀介质中粒子运动的标准统计方法来描述。从宏观上讲，大量粒子运动的统计规律不符合标准的统计分布，中心极限定理不再适用，点源条件下扩散过程的均方位移和时间的关系为

$$\langle x^2(t)\rangle \propto t^{\alpha}, \quad \alpha > 0. \tag{1.1.1}$$

当 $\alpha = 1.0$ 时为正常扩散过程，$\alpha \neq 1.0$ 称为反常扩散过程，其中 $\alpha < 1.0$ 称为次扩散 (亚扩散或慢扩散)；$\alpha > 1.0$ 称为超扩散 (快扩散)。从应用角度讲，不符合 Fick 第二扩散定律的扩散过程都可以称为反常扩散。

1.2　自然界和工程中的反常扩散现象

反常扩散既是一个重要的物理课题，也是工程中普遍涉及的一个现实问题。以我国当前严重的环境污染为例，地下水与土壤的污染问题是主要环境问题之一。随着工业的发展，特别是制造业的发展，人赖以生存的水和土壤污染越来越严重。根据污染物的不同可分为：无机废物 (重金属、盐类)[2, 3]、有机污染 (包括生物难降解物和可降解物)[4]、化肥、农药和放射性物质等[5]。据报道，全国每年因重金属污染而减产粮食 1000 多万吨，另外被重金属污染的粮食每年也多达 1200 万吨，合计经济损失至少 200 亿元。而且它也间接造成了人类体质的下降，使得多种疾病的发病率明显升高 [6–8]。同时，地下水污染也相当严重，据中国地下水信息网报道，我国的大中城市都存在不同程度的地下水污染，并且北方城市地下水污染的程度一般比南方城市更严重。如果按地区来说，东北和华北地区比较严重，西北和南方地区污染相对较轻。主要的污染物包括：硝酸盐氮、氨氮、铅、砷、铬、石油类等[9]。据 2001 年的报道，在距离北京不远的河北白洋淀与洋河地区，在 15m 深的地下水中草脱净 (阿特拉津，Atrazine，$C_8H_{14}ClN_5$) 的含量为 3.29μg/L, 在 130m 深的地下水中，草脱净的含量为 0.72μg/L[10, 11]。为了治理上述各种污染问题，需要掌握复杂介质中水和各类溶质的扩散和运移规律，从而为治理提供依据。

气象、生态和生物等领域中的研究也经常涉及水在复杂介质中的扩散和运移过程。因此，复杂介质中水的扩散和运移规律是环境、气象和生物等领域关心的主要课题之一。其重要性体现在下列两个方面：第一，水分的扩散和运移直接影响地球的水循环、生物对水分的吸收、地下水的利用等[12]；第二，水分扩散和运移过程直接影响水中溶质的扩散和运移，它是溶质扩散和运移研究的基础课题之一[13]。同时，各种溶质和水分在土壤或地下水中的迁移属溶质的运移问题，它直接影响到地圈-生物圈的物质循环。量化描述污染物或各种溶质粒子在复杂介质中的时空分布特征和迁移规律可以为污染控制、环境和生态保护提供理论依据。

Fick 扩散理论是针对理想均匀介质中的扩散过程而提出的，但是实际的土壤水力学特性一般是不均匀的、各向异性的，因此 Fick 定律在通常尺度下不适用。在研究天然土壤与地下含水层等复杂介质中水和溶质的扩散或运移时，研究人员发现经典的 Fick 扩散理论不能直接应用到水分或溶质迁移过程的研究，而需要深入分析其中的反常扩散现象。反常扩散或反常运移现象在地下含水层溶质迁移、土壤中污染物扩散、湍流等领域都已经被观察到。反常扩散是指不服从经典的 Fick 定律的扩散现象，又称为非 Fick 扩散，在统计上经常可以由伸展高斯分布和 Lévy 分布等进行描述，其二阶矩可表示为 $\langle x^2(t)\rangle \propto t^\alpha$, $\alpha > 0$, $\alpha \neq 1$。非 Fick 扩散或迁移产生的根本原因可以总结为：①高度非均质介质中的复杂流场；②流动相与静止态之间的质量交换或溶质的化学反应[14]。而在非 Fick 扩散或迁移课题的研究中关键问题之一是反常扩散 (非 Fick 扩散) 过程的物理建模与数值模拟。同时，反常扩散建模和数值模拟的一个最基本也是最重要的工作是提出合适的理论模型来量化分析复杂介质中的扩散现象，这就是本书所要介绍的主要工作和研究目的。反常扩散研究将有助于准确预测土壤与地下水的污染程度，评估污染物对土壤或地下含水层的长期环境影响，进而为土壤和地下水污染的治理提供依据[15−17]。反常扩散的研究成果也可以直接应用于解决其他的环境问题，如海水入侵、核废料处理、烂尾矿、混凝土腐蚀等[18, 19]。

由于反常扩散的研究与分数阶布朗运动直接相关，在理论上，反常扩散的研究也对深入理解分数阶布朗运动与涨落理论具有重要的价值，反常扩散也是力学与物理学的一个重要理论研究课题。同时，热传导、药物扩散和半导体导电研究等许多问题实际上都涉及反常扩散过程，本书所介绍的研究成果也同样适用。

1.3　研究历史与现状

1.3.1　反常扩散建模与应用

反常扩散概念的提出可以追溯到 1905 年爱因斯坦发表的第一篇关于扩散问题

的文章。随后，研究人员提出了反常扩散的二阶矩表达式 $\langle x^2(t)\rangle \propto t^\alpha(\alpha>0)$，当 $\alpha=1.0$ 时，它表示正常扩散[20, 21]。反常扩散的研究方法和正常扩散过程类似，其一是对 Fick 第一和第二定律进行改进，建立通量和流的本构关系，进而研究反常扩散方程，求解反常扩散过程的相关物理量，此为微分方程模型；其二是通过分析反常扩散过程的统计规律，使用非常规统计方法来刻画反常扩散的规律，同时借助非常规统计方法建立随机行走模型，可以称为统计型方法。现在非整数阶扩散方程与基于概率统计的随机行走模型是解决反常扩散问题的两种主要研究方法。需要说明的是，在通常情况下两种方法具有等价性，可以得到相同的分析结果[22]。反常扩散的两种研究方法和统计描述之间的内在联系可由图 1.3.1 表示。

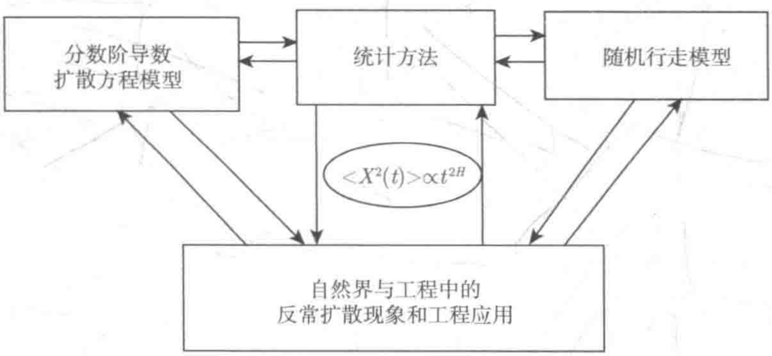


图 1.3.1 反常扩散过程分数阶导数模型、统计描述和随机行走模型之间的内在联系

反常扩散或迁移过程的模型研究在国外起始于 20 世纪六七十年代，在七八十年代文献报道较多。该领域的早期工作包括 Montroll 和 Scher 关于随机行走模型的研究[23, 24]。1965 年，美国耶鲁大学的 Mandelbrot 教授提出了分形的概念，并认为自然界和工程中存在着大量分数维的现象，其本质是整体和局部之间的自相似性[25]。随后的一系列研究结果表明，土壤和地下含水层等复杂介质中的颗粒尺寸、孔隙形状和结构表面等可能具有分形特征, 分形结构复杂介质中的扩散行为不再符合 Fick 定律[26]。此后，基于复杂介质的分形特征分析反常扩散过程成为研究的主流方向之一[27−30]。但是早期的研究主要集中在应用统计方法来描述反常扩散现象，微分方程建模方面的工作较少，这严重制约了反常扩散理论研究的进展与工程应用的发展。

对于微分方程建模，整数阶导数的扩散模型不能很好地刻画污染物扩散或迁移实验结果中存在的早到达 (early breakthrough) 和拖尾 (heavy tail) 现象[31, 32]。也就是说，污染物扩散的实验结果一般比经典模型预测的更早，这就增加了污染物对生态环境的破坏力；同时经典模型的长期预测往往不准确，实际观测的浓度

值比经典模型的预测结果一般更高，这就增加了污染物治理的难度[14]。可以说准确地模拟反常扩散或迁移过程的非 Fick 特征和非高斯分布特征是一个非常重要的课题，然而经过数十年的研究，仍没有完全解决。为了更好地描述这种反常扩散行为，研究人员开始寻找新的数学物理工具。目前复杂介质中溶质扩散迁移问题的研究手段可分为四种：①经典对流-扩散方程的随机平均方法；②多速率质量迁移方法[33]；③随机行走方法[21, 34]；④分数阶对流-扩散方程法及其扩展形式：T-分数阶对流-扩散方程[14]，其关键问题还是如何刻画空间分布的非高斯分布特征，提出简单、高效的数学物理模型。分数阶导数在数学上是由卷积积分表达的，在物理上可以理解为记忆性或非局域性算子；这些特征与反常扩散过程具有的历史依赖性和全域相关性是一致的，因而分数阶导数成为反常扩散建模的重要数学手段。在一维情况下，应用最广泛的分数阶对流-扩散主方程可以写为

$$\frac{\partial^\alpha u(x,t)}{\partial t^\alpha} = -A\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}\left(K\frac{\partial^\beta u(x,t)}{\partial x^\beta}\right), \quad t > 0, \tag{1.3.1}$$

式中，$u(x,t)$ 为含水率或者溶质浓度，$\alpha \in (0,1]$ 为时间分数阶导数，表示粒子扩散过程的历史依赖性，描述实验数据中在某一空间点在时间方向上表现出的拖尾现象，或称为幂律现象；$\beta \in (0,1]$ 为空间分数阶导数，表示粒子扩散行为的空间非局域特征，刻画粒子在空间分布上表现出的非高斯分布 (正态分布) 特征[35]；A 和 K 分别为对流和扩散系数，如果 $A = 0$，则方程变为简单的时间-空间分数阶扩散方程。在瞬时注入点源或者持续注入点源的条件下，配合适当的边界条件，可得方程的解析解[36, 37, 38, 21]。

在分数阶模型 (1.3.1) 基础上，根据不同的应用背景不同形式的改进型分数阶扩散模型也已经出现在相关文献中。在某些复杂介质 (例如土壤) 中，扩散过程中介质结构会随之发生变化，从而使得扩散行为发生变化，在此条件下分数阶扩散方程的阶数 $\alpha(x,t)$ 和 $\beta(x,t)$ 可能也随着时间或者空间的变化发生改变，阶数可能为时间或者空间的函数；同时如果扩散过程与生物 (例如细菌) 活性相关，那么方程的阶数甚至可能为浓度的函数 $\alpha(u)$ 和 $\beta(u)$，此时的分数阶扩散模型称之为变导数扩散模型，这部分内容将在第四章进行较为详细的论述[39, 40]。为了描述复杂介质中扩散过程在不同时期表现出不同的幂律特征，研究人员从物理和数学角度提出了分布式扩散模型，其重要特点是分数阶导数的阶数由固定值变为积分或者级数和的形式 [41–48]。由于在分数阶模型中，假设了粒子运动在统计上的二阶矩为无穷大，其对应的统计描述为 Lévy 分布，但是这种理论也有其局限性，如位移的二阶矩为无穷大，因此 Meerschaert 和张勇等提出了 T-分数阶导数的概念，并用于粒子扩散和迁移问题的分析[49, 50]。关于分数阶导数模型在水文领域的应用，请参考以下文献：地下含水层中的溶质运移 [51–56]、非饱和土壤水分运移 [57–59]、土壤中的

溶质迁移等[60, 61]。

在反常扩散的统计方法研究中，使用最多的是 Lévy 分布，它已经应用到湍流、土壤和地下含水层、生物流体、半导体等介质中存在的反常扩散现象分析。研究人员认为传统的高斯分布 (正态分布) 统计方法只适合于正常扩散现象对应的布朗运动，因为完全自由碰撞的粒子运动是理想状态，而在实际的粒子运动中，粒子受到介质结构或流体紊动程度等因素的影响，不能使用高斯分布的统计方法进行描述，并且相对于正常扩散，反常扩散中粒子空间分布的二阶矩变化范围更大，需使用更一般的稳定分布 Lévy 分布来描述[62]。

随机行走模型是应用各种统计方法研究粒子扩散问题最直观的模型，它来源于粒子布朗运动的数值模拟。在布朗运动的数值模拟过程中，粒子每一次的跳跃距离与等待时间 (时间间隔) 都有一定的限制，一般假设跳跃距离的随机分布符合正态分布的特征，而等待时间假设为相等时间间隔。在反常扩散中，粒子的跳跃距离与等待时间不再局限于正态分布，它可以模拟某一特定的反常扩散过程。随机行走模型首先由 Montroll、Scher 和 Weiss 引入统计力学来研究反常扩散过程，这种方法的思想是从微观角度出发，由正常扩散转移概率扩展到反常扩散的转移概率 [63−65,162]。随机行走模型可分为连续时间随机行走模型与离散随机行走模型。这里以连续时间随机行走模型为例讲述其主要思路。假设为在时刻 t 在 x 位置发现随机粒子的概率为 $p(x,t)$，则可以得到以下表达式：

$$\begin{cases} p(x,t)=\delta(x)\Psi(t)+\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\xi\int_0^t\varphi(\xi,\tau)p(x-\xi,t-\tau)\mathrm{d}\tau, \\ \Psi(t)=1-\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\xi\int_0^t\varphi(\xi,\tau)\mathrm{d}\tau, \end{cases} \tag{1.3.2}$$

式中，$\varphi(x,t)$ 为跳跃步长和等待时间的联合分布函数，如果两者是独立的，则 $\varphi(x,t)$ 可分解为 $\varphi(x,t)=\phi(t)\omega(x)$，其中 $\phi(t)$ 表示等待时间的概率密度函数；$\omega(x)$ 表示跳跃步长的概率密度函数。通过采用不同形式的跳跃步长的概率密度函数和等待时间的概率密度函数，可以描述不同特征的反常扩散现象[66]。关于连续时间随机行走模型在复杂介质中反常扩散或非 Fick 迁移的应用请参考文献 [34, 67 − 69]。反常扩散建模的物理基础和本书主要的研究内容可以通过图 1.3.2 表达出来。

除了上述的分数阶模型和随机行走模型之外，反常扩散研究中使用的其他微分方程建模手段包括：分形导数模型[27]、局部分数阶导数模型等；在统计方法方面有 Tsallis 统计、幂律分布方法和扩展高斯分布方法等。复杂介质中反常扩散问题的研究已经取得了大量的研究成果，特别是分数阶导数扩散模型已经在地下水中溶质迁移、土壤中重金属扩散等领域有了一些实际的应用。但是，随着研究的深入，一些深层次的问题也随之暴露出来，例如：如何建立模型的分数阶导数与介质

几何结构与物理属性之间的量化关系、如何利用分数阶导数模型刻画多尺度的反常

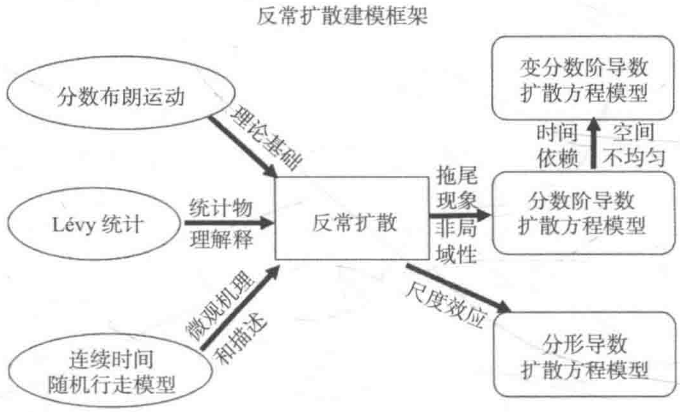


图 1.3.2　反常扩散物理基础、特征及其数学物理建模方法

扩散或迁移过程、如何使用分数阶导数模型来刻画非均匀各向异性介质中的扩散过程等，这些也将是本书的重点内容。

1.3.2　反常扩散的数值模拟方法

近年来分数阶导数已成为描述各类复杂力学与物理行为的重要工具，因而分数阶扩散方程的理论研究和数值算法研究也成为反常扩散研究的主要课题之一。分数阶扩散模型的理论研究已有较长的历史，在过去 30 年中，理论建模和实验数据分析已经取得了实质性的进展 [70−73,462]，而数值算法研究的历史只有大约 20 年，且真正较系统的研究是最近 10 年。本节将叙述分数阶扩散方程的主要数值算法和存在的主要问题。

分数阶导数在数学上的一个主要特点是它的非局部性，因而分数阶导数力学控制方程数值模拟的计算量和存储量极大。目前国际上相应的计算力学方法研究还处于起步阶段，只能模拟一些小规模的简单问题。即使使用高性能计算机，也很难进行长时间历程或大计算域的模拟。虽然研究人员已经提出了一些算法，但是多数是把整数阶方程的数值算法直接嫁接到分数阶方程，没有充分考虑分数阶导数本身的特点。大量的研究成果表明分数阶导数的数值离散不能像处理整数阶导数那样采用单步法随意截断，为了减少数值计算量，提高计算效率，一些学者提出了短期记忆 (short memory) 算法。该算法为了减少计算量，数值离散时仅考虑该时刻以前有限时间段的影响，这类似于标准整数阶常微分方程数值解中的多步法 [74,398]。但是，英国 Ford 教授等发现短期记忆算法在计算某些问题时表现出计算不稳定性[75]。此外，分数阶导数力学动力系统的计算稳定性还缺乏系统的分析研究。

在分数阶方程的有限差分算法方面，2002 年 Diethelm 较为详细地讨论了预估-矫正方法，该方法的精度较高，编程简单，是求解分数阶常微分方程非常有效的算法[76]。对于时间或者空间分数阶扩散方程的计算，有限差分算法适用范围最广，有限差分算法的优势在求解小空间域和短时间历程问题上得到了充分的体现，算法的精度和稳定性可以满足实际数值模拟的需要[77−79,82−85,231,232]。有限差分算法研究的一些主要工作包括：针对时间分数阶扩散方程，刘发旺等提出了隐式有限差分算法[86]；Yuste 等提出了权重平均形式的有限差分法[87]；崔明荣提出了紧凑型有限差分法[88]；林育民等通过在空间上使用 Legendre 谱方法得到了更为精确且稳定的算法[89]。在空间分数阶扩散方程的计算方面，Meerschaert 等提出了一种在时间和空间都具有二阶精度的改进 Crank-Nicholson 方法求解空间分数阶扩散方程[90, 230]，但计算量较大；刘发旺等也提出了一种显式近似算法求解空间分数阶扩散方程，但稳定性较差[91]。2009 年 Podlubny 等提出了矩阵方法来求解时间-空间分数阶扩散方程，并取得了较好的效果，这种方法的主要优点是操作简单、应用面广、稳定性好[92]；同时 Hanert 提出了一种比较灵活的数值算法离散时间-空间分数阶扩散方程，主要特点是在离散过程中既可以使用有限差分法也可以使用有限单元法[93]。需要指出的是，如果需要使用有限差分算法计算长时间历程问题或大计算域问题，则计算量呈指数增加。

在有限单元法方面，因为有限单元法更利于复杂空间计算域的离散，因此成为当前数值算法研究的热点。2004 年，Roop 等应用 Galerkin 和最小二乘有限单元法求解了平衡状态下二维的空间对流-扩散方程[94, 95]。黄权中和黄冠华等提出了无条件稳定的有限单元法求解一维空间分数阶对流-扩散方程，并成功应用于模拟农药阿特拉津在饱和土柱中的迁移过程[60]。邓伟华发展了一种收敛阶数达到 $O(k^{2-\alpha}+h^{\mu})$ 的有限单元法，求解了时间-空间分数阶 Fokker-Planck 方程，其中 α 和 μ 表示时间和空间分数阶导数的阶数[84]。刘发旺等考察了求解对称形式空间分数阶扩散方程的 Galerkin 有限单元法[96]。李常品等提出了求解非均匀初边界条件下空间分数阶对流-扩散方程的有限单元法[97−99]。需要指出的是，在求解高 Péclet 数的整数阶对流-扩散方程时，一般的数值解法都会出现解的震荡[100−104]，这个问题也是求解分数阶扩散方程遇到的主要问题之一。

此外，无网格方法由于不需要网格划分，与分数阶导数的定义比较吻合，应用无网格方法求解分数阶扩散方程被视为一种很有前途的研究方向。在 2009 年陈文等首次提出了使用 RBF 无网格方法求解时间分数阶扩散方程，随后刘发旺和庄平辉等也提出了 MLS 和隐式 RBF 方法等求解分数阶扩散方程[105, 106]。一些解析或半解析方法，如同伦摄动方法、变分迭代算法、Adomian 分解法等也是分数阶扩散方程求解的研究方向，这里不再赘述。

此外， 分数阶导数的定义主要有三种形式， 即 Grunwald-Letnikov 定义、