Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. В. Учайкин, К теории аномальной диффузии частиц с конечной скоростью
свободного движения, *ТМФ*, 1998, том 115, номер 1, 154–160

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf863>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и
согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.196.121.252

26 апреля 2023 г., 17:56:22

© 1998 г.

В. В. Учайкин*

К ТЕОРИИ АНОМАЛЬНОЙ ДИФФУЗИИ ЧАСТИЦ С КОНЕЧНОЙ СКОРОСТЬЮ СВОБОДНОГО ДВИЖЕНИЯ

Исследовано асимптотическое поведение ширины диффузионного пакета в случае аномальной диффузии со степенным распределением пробегов и времен ожидания в ловушках для частицы с конечной скоростью свободного движения.

В ряде работ (см., например, [1–4]) рассматриваются процессы аномальной диффузии, наблюдаемые в турбулентных средах, вращающихся потоках, вблизи границ между жидкостями и твердыми телами, в пористых материалах, полимерных стеклах, биомембранах и других средах сложной или хаотической структуры. Аномальная диффузия характеризуется тем, что ширина диффузионного пакета растет со временем по степенному закону t^γ , где показатель γ отличается от значения $1/2$, соответствующего нормальной диффузии. Кинетической моделью такого процесса является блуждание частиц в среде с ловушками, причем распределение пробегов $p(\xi)$ и времени пребывания в ловушке $q(\tau)$ характеризуются асимптотическим поведением степенного типа:

$$p(\xi) \sim \alpha A \xi^{-\alpha-1}, \quad \xi \rightarrow \infty, \quad (1)$$

$$q(\tau) \sim \beta B \tau^{-\beta-1}, \quad \tau \rightarrow \infty, \quad (2)$$

где $\alpha < 1$, $\beta < 1$, A и B — положительные постоянные. В [3] показано, что ширина диффузионного пакета в этом случае возрастает со временем по закону

$$|\overline{R(t)}| \sim \text{const} \cdot t^{\beta/\alpha}, \quad t \rightarrow \infty. \quad (3)$$

В соответствии с терминологией, принятой в работах [1, 2, 4], при $\beta/\alpha < 1/2$ имеет место субдиффузия, при $\beta/\alpha > 1/2$ — супердиффузия.

*Ульяновский государственный университет, Ульяновск, Россия.
E-mail: UCHAIKIN@THEMP.UNIV.SIMBIRSK.SU

При выводе (3) предполагалось, что переход частицы из одной точки в другую совершается мгновенно, т.е. скорость ее свободного движения между столкновениями бесконечна. Явно это приближение не аргументировано, но можно предположить, что подразумевается аналогия с нормальной диффузией, когда телеграфное уравнение, описывающее блуждание частицы с конечной скоростью v и переходящее в уравнение диффузии при $v \rightarrow \infty$, уже при небольших временах дает решение, близкое к диффузионному ($v = \infty$) пределу [5]. В данной работе мы показываем, что в случае аномальной диффузии ситуация совершенно иная: конечностью скорости движения блуждающей частицы пренебрегать нельзя и асимптотическая формула (3) места не имеет.

Рассмотрим процесс симметричного блуждания в N -мерном пространстве. Пусть $R_i(t)$ — N -мерный случайный вектор, характеризующий смещение блуждающей частицы за время t . Индекс i указывает здесь на начальное состояние частицы: $i = 0$, если она начинает свою историю с попадания в ловушку, и $i = 1$, если с выхода из нее. Скорость движения частицы считается постоянной и не зависит от направления. Взаимодействие (столкновение) движущейся частицы со средой с вероятностью ε_0 приводит к захвату ее ловушкой и с вероятностью ε_1 — к рассеянию. Угловые распределения рассеянных и покидающих ловушки частиц считаются изотропными.

В соответствии с данной моделью можно записать следующее стохастическое соотношение для случайного вектора смещения:

$$R_0(t) = \begin{cases} 0 & \text{с вероятностью } Q(t), \\ R_1(t - \tau) & \text{с вероятностью } q(\tau) d\tau; \end{cases} \quad (4)$$

$$R_1(t) = \begin{cases} vt\Omega & \text{с вероятностью } P(vt) d\Omega/S, \\ \xi\Omega + R_1(t - \xi/v) & \text{с вероятностью } \varepsilon_1 p(\xi) d\xi d\Omega/S, \\ \xi\Omega + R_0(t - \xi/v) & \text{с вероятностью } \varepsilon_0 p(\xi) d\xi d\Omega/S, \end{cases} \quad (5)$$

здесь

$$Q(t) = \int_t^\infty q(\tau) d\tau, \quad P(x) = \int_x^\infty p(\xi) d\xi,$$

Ω — единичный вектор, $d\Omega$ — элемент сферической поверхности единичного радиуса в окрестности Ω , S — площадь сферы, $S = \oint d\Omega$. Возводя (4), (5) в квадрат и усредняя по случайным переменным, получим

$$\overline{R_0^2}(t) = \int_0^t \overline{R_1^2}(t - \tau) q(\tau) d\tau, \quad (6a)$$

$$\begin{aligned} \overline{R_1^2}(t) &= (vt)^2 P(vt) + \int_0^{vt} \xi^2 p(\xi) d\xi + \\ &+ \int_0^{vt} [\varepsilon_0 \overline{R_0^2}(t - \xi/v) + \varepsilon_1 \overline{R_1^2}(t - \xi/v)] p(\xi) d\xi. \end{aligned} \quad (6b)$$

Интегрируя второе слагаемое правой части уравнения (6б) по частям

$$\int_0^{vt} \xi^2 p(\xi) d\xi = - \int_0^{vt} \xi^2 \frac{dP}{d\xi} d\xi = -(vt)^2 P(vt) + 2 \int_0^{vt} P(\xi) \xi d\xi,$$

перепишем (6б) в виде

$$\overline{R_1^2}(t) = 2 \int_0^{vt} P(\xi) \xi d\xi + \int_0^{vt} [\varepsilon_0 \overline{R_0^2}(t - \xi/v) + \varepsilon_1 \overline{R_1^2}(t - \xi/v)] p(\xi) d\xi. \quad (7)$$

Решение системы интегральных уравнений (6), (7) будем искать с помощью преобразования Лапласа:

$$\overline{R_i^2}(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Delta-i\infty}^{\Delta+i\infty} e^{\lambda t} L_i(\lambda) d\lambda, \quad (8)$$

$$L_0(\lambda) = \tilde{q}(\lambda) L_1(\lambda), \quad (9)$$

$$L_1(\lambda) = \frac{2h(\lambda/v)}{\lambda \{1 - [\varepsilon_1 + \varepsilon_0 \tilde{q}(\lambda)] \tilde{p}(\lambda/v)\}}, \quad (10)$$

где $\tilde{q}(\lambda)$, $\tilde{p}(\lambda)$ и $h(\lambda)$ – изображения Лапласа функций $q(\tau)$, $p(\xi)$ и $\xi P(\xi)$, соответственно.

В случае экспоненциальных распределений

$$p_\mu(\xi) = \mu e^{-\mu \xi}$$

и

$$q_\sigma(\tau) = \sigma e^{-\sigma \tau}$$

обратное преобразование (8) выражается в элементарных функциях. Учитывая, что

$$\tilde{p}_\mu(\lambda) = \frac{\mu}{\lambda + \mu}, \quad \tilde{q}_\sigma(\lambda) = \frac{\sigma}{\sigma + \lambda}, \quad h_\mu(\lambda) = \frac{1}{(\lambda + \mu)^2},$$

и подставляя эти выражения в (10), имеем

$$L_1(\lambda) = \frac{2v^2(\lambda + \sigma)}{\lambda^2(\lambda + \mu v)(\lambda + \sigma + \varepsilon_0 \mu v)}.$$

Эта функция имеет полюс 2-го порядка в точке $\lambda = 0$ и два простых полюса в точках $\lambda_1 = -\mu v$ и $\lambda_2 = -(\sigma + \varepsilon_0 \mu v)$. Используя при обратном преобразовании Лапласа метод вычетов, после некоторых преобразований приходим к формуле

$$\begin{aligned} \overline{R_1^2}(t) = & \frac{2\sigma v t}{\mu(\sigma + \varepsilon_0 \mu v)} - \frac{2(\sigma - \mu v)}{\mu^2(\sigma - \varepsilon_1 \mu v)} (1 - e^{-\mu v t}) - \\ & - \frac{2\varepsilon_0 \mu v^3}{(\sigma + \varepsilon_0 \mu v)^2(\sigma - \varepsilon_1 \mu v)} [1 - e^{-(\sigma + \varepsilon_0 \mu v)t}]. \end{aligned} \quad (11)$$

В отсутствие ловушек ($\varepsilon_0 = 0$) выражение (11) переходит в результат Монины [5], полученный интегрированием решения телеграфного уравнения

$$\overline{R_1^2}(t) = 2(v/\mu)t - (2/\mu^2)(1 - e^{-\mu vt}), \quad (12)$$

который в асимптотическом пределе соответствует обычной диффузии

$$\overline{R_1^2}(t) \sim 2Dt, \quad t \rightarrow \infty,$$

с коэффициентом диффузии $D = v/\mu$. Заметим, что если в (12) устремить v и μ к бесконечности так, чтобы $v/\mu \rightarrow D$, то в пределе получим

$$\lim_{\substack{v \rightarrow \infty \\ v/\mu \rightarrow D}} \overline{R_1^2}(t) = 2Dt$$

при всех t .

При наличии ловушек ($\varepsilon_0 \neq 0$) формула (11) имеет асимптотический вид

$$\overline{R_1^2}(t) \sim \frac{2\sigma(v/\mu)}{\sigma + \varepsilon_0\mu v}t, \quad t \rightarrow \infty,$$

тогда как переход к $v = \infty$ в (11) может быть осуществлен безотносительно к μ и дает

$$\lim_{v \rightarrow \infty} \overline{R_1^2}(t) = [2/(\varepsilon_0\mu^2)](\sigma t + 1) \sim [2\sigma/(\varepsilon_0\mu^2)]t.$$

Таким образом, в случае нормальной диффузии в среде с ловушками влияние скорости частицы на асимптотическое поведение среднеквадратичного смещения

$$\Delta = \sqrt{\overline{R_1^2}(t)} \sim \sqrt{2Dt}^{1/2}, \quad t \rightarrow \infty,$$

осуществляется только через коэффициент диффузии D , тип же функциональной зависимости остается тем же самым ($\Delta \sim \text{const} \cdot t^{1/2}$).

В случае аномальной диффузии с распределениями (1), (2) в элементарном виде выражаются лишь асимптотические формулы для $\overline{R_1^2}(t)$ при $t \rightarrow \infty$. Мы получим их на основе тауберовой теоремы (см., например, [6]), согласно которой изображение Лапласа

$$\tilde{u}(\lambda) = \int_0^\infty e^{-\lambda t} u(t) dt$$

монотонной (начиная с некоторого t) функции $u(t)$ имеет асимптотическое представление

$$\tilde{u}(\lambda) \sim c\lambda^{-\rho}, \quad \lambda \rightarrow 0, \quad (13)$$

тогда и только тогда, когда

$$\tilde{u}(t) \sim \frac{c}{\Gamma(\rho)} t^{\rho-1}, \quad \rho > 0, \quad t \rightarrow 0. \quad (14)$$

Из (1), (2) непосредственно следует, что при $\lambda \rightarrow 0$

$$\tilde{p}(\lambda) \sim 1 - A\Gamma(1 - \alpha)\lambda^\alpha, \quad (15)$$

$$\tilde{q}(\lambda) \sim 1 - B\Gamma(1 - \beta)\lambda^\beta, \quad (16)$$

$$h(\lambda) \sim A\Gamma(2 - \alpha)\lambda^{-2+\alpha}. \quad (17)$$

Заметим, что условия $\alpha < 1$ и $\beta < 1$ означают бесконечность средних значений пробега и времени ожидания в ловушке. Рассмотрим сначала случай, когда средний пробег конечен, тогда

$$\tilde{p}(\lambda) \sim 1 - \bar{\xi}\lambda + C\lambda^\delta, \quad 1 < \delta \leq 2, \quad \lambda \rightarrow 0. \quad (18)$$

При $\delta = 2$ и средний квадрат пробега конечен, т.е.

$$\bar{\xi}^2 = 2C.$$

Изображение $h(\lambda)$ при этом имеет вид

$$h(\lambda) = \frac{1 - \tilde{p}}{\lambda^2} + \frac{1}{\lambda} \frac{d\tilde{p}}{d\lambda} \sim C(\delta - 1)\lambda^{-(2-\delta)}. \quad (19)$$

Подставляя (16), (18) и (19) в (10), получим

$$L_1(\lambda) \sim \frac{2C(\delta - 1)v^{2-\delta}}{\varepsilon_0 B\Gamma(1 - \beta)} \lambda^{-(3-\delta+\beta)}, \quad \lambda \rightarrow 0,$$

что согласно (13), (14) ведет к асимптотической формуле

$$\overline{R_1^2}(t) \sim \frac{2C(\delta - 1)v^{2-\delta}}{\varepsilon_0 B\Gamma(1 - \beta)\Gamma(3 - \delta + 2)} t^{2-\delta+\beta}, \quad t \rightarrow \infty.$$

Таким образом, при $\beta = \delta - 1$ мы получаем результат, аналогичный нормальной диффузии (единственное отличие от нормальной диффузии в среде с ловушками то, что коэффициент диффузии зависит от скорости). При $\beta < \delta - 1$ ширина диффузионного пакета растет со временем медленнее, чем $t^{1/2}$, и мы имеем субдиффузию, при $\beta > \delta - 1$ ситуация обратная (супердиффузия). Если дисперсия пробега конечна ($\delta = 2$), то условие

$\beta < \delta - 1$ выполняется всегда (напомним, что $\beta < 1$) и имеет место субдиффузия с коэффициентом диффузии

$$D = \frac{C}{\varepsilon_0 B \Gamma(1 - \beta)},$$

не зависящим от скорости.

Вернемся теперь к случаю, рассмотренному в [3], когда оба распределения $p(\xi)$ и $q(\tau)$ имеют бесконечные средние значения, а их изображения Лапласа даются выражениями (15)–(17) при $\alpha < 1$ и $\beta < 1$. Подставляя их в формулы (9), (10), после несложных преобразований получим

$$L_0(\lambda) \sim L_1(\lambda) \sim \frac{2A\Gamma(2 - \alpha)v^2\lambda^{-3}}{A\Gamma(1 - \alpha) + \varepsilon_0 B \Gamma(1 - \beta)v^\alpha\lambda^{\beta - \alpha}}, \quad \lambda \rightarrow 0.$$

Если $\alpha < \beta$, то

$$L_i(\lambda) \sim 2(1 - \alpha)v^2\lambda^{-3}, \quad \lambda \rightarrow 0,$$

и согласно (13), (14)

$$\overline{R_i^2}(t) \sim (1 - \alpha)v^2t^2, \quad t \rightarrow \infty.$$

При $\alpha = \beta$ имеем

$$L_i(\lambda) \sim \frac{2A(1 - \alpha)v^2}{A + \varepsilon_0 B v^\alpha} \lambda^{-3}, \quad \lambda \rightarrow 0,$$

и

$$\overline{R_i^2}(t) \sim \frac{2A(1 - \alpha)v^2}{A + \varepsilon_0 B v^\alpha} t^2, \quad t \rightarrow \infty.$$

Наконец, при $\alpha > \beta$

$$L_i(\lambda) \sim \frac{2A\Gamma(2 - \alpha)v^{2 - \alpha}}{\varepsilon_0 B \Gamma(1 - \beta)} \lambda^{-3 + \alpha - \beta}, \quad \lambda \rightarrow 0,$$

$$\overline{R_i^2}(t) \sim \frac{2A\Gamma(2 - \alpha)v^{2 - \alpha}}{\Gamma(3 - \alpha + \beta)\varepsilon_0 B \Gamma(1 - \beta)} t^{2 - \alpha + \beta}, \quad t \rightarrow \infty.$$

Таким образом, среднеквадратичное смещение при $t \rightarrow \infty$ выглядит следующим образом:

$$\Delta(t) \sim \sqrt{1 - \alpha}vt, \quad \alpha < \beta,$$

$$\Delta(t) \sim \left[\frac{A(1 - \alpha)}{A + \varepsilon_0 B v^\alpha} \right]^{1/2} vt, \quad \alpha = \beta,$$

$$\Delta(t) \sim \left[\frac{2A\Gamma(2 - \alpha)v^{-\beta}}{\varepsilon_0 B \Gamma(1 - \beta)\Gamma(3 - \alpha + \beta)} \right]^{1/2} (vt)^{1 - (\alpha - \beta)/2}, \quad \alpha > \beta,$$

и при любых $\alpha < 1$ и $\beta < 1$ мы имеем дело с супердиффузией.

При $v \rightarrow \infty$ любое из последних выражений расходится и не может быть использовано в качестве характеристики ширины распределения. Не имеет смысла, кстати, и левая часть (3), расходящаяся (при любом $t > 0$) вследствие формулы (1).

Таким образом, учет конечности скорости движения частицы между столкновениями в случае аномальной диффузии радикально изменяет асимптотическое поведение ширины диффузионного пакета при $t \rightarrow \infty$, которое существенным образом отличается от результата (3), полученного в приближении $v = \infty$ [3].

При этом субдиффузия возникает только в случае, если пробег имеет конечное среднее значение, а время ожидания в ловушке распределено по закону (2) и выполняется условие $\beta < \delta - 1$. При $\beta > \delta - 1$, а также при любых $\alpha < 1$, $\beta < 1$ (средний пробег и среднее время ожидания бесконечны) имеет место супердиффузия. Линейная зависимость $\Delta \sim \text{const} \cdot t$ при $\alpha \leq \beta$ означает, что основную роль в формировании асимптотического поведения здесь играет свободное движение частицы; при $\alpha \rightarrow 0$ мы получаем свободное движение в чистом виде: $\Delta(t) = vt$.

Изложенный выше подход может быть применен, в частности, к решению задачи о хаотическом движении заряженных частиц высокой энергии в кристалле, подробно рассмотренной в работе [7], где показано, что обычное уравнение переноса дает среднеквадратичные углы рассеяния, в несколько раз отличающиеся от результатов прямого численного моделирования [7, рис. 19, с. 324]. Причина этого заключается, по нашему мнению, в том, что “коридоры”, образуемые рядами атомов, являются своего рода ловушками для частиц, падающих под малыми углами. Распределение времени пребывания в них описывается не экспоненциальным законом, на котором основывается обычное уравнение, а скорее всего степенным законом, возникающим при рассмотрении “бильярда Синая” и приводящим к аномальной диффузии [1].

Работа выполнена при поддержке Государственного комитета РФ по высшему образованию (грант № 95-0-3.1-23).

Список литературы

- [1] J.-P. Bouchaud, A. Georges. Phys. Rep. 1990. V. 195. P. 127–293.
- [2] M. B. Isichenko. Rev. Mod. Phys. 1992. V. 64. P. 961–1043.
- [3] V. V. Afanasiev, R. Z. Sagdeev, G. M. Zaslavsky. Chaos. 1991. V. 1 (2). P. 143–159.
- [4] К. В. Чукбар. ЖЭТФ. 1995. Т. 108. С. 1875–1884.
- [5] А. С. Монин, А. М. Яглом. Статистическая гидромеханика. V. 1. Санкт-Петербург: Гидрометеиздат, 1992.
- [6] В. Феллер. Введение в теорию вероятностей и ее приложения. V. 2. М.: Мир, 1984.
- [7] A. J. Akhiezer, V. I. Truten, N. F. Shul'ga. Phys. Rep. 1991. V. 195. P. 289–343.

Поступила в редакцию 23.IX.1997 г.,
после доработки 6.XI.1997 г.