УДК 519.6

Субдиффузия переменного порядка: интерпретация в терминах модели многократного захвата*

Сибатов Р.Т.[1,2]

НПК «Технологический центр»[1]
Ульяновский государственный университет[2]

Аннотация: В рамках модели дисперсионного транспорта с многократным захватом было обосновано уравнение аномальной диффузии с производной переменного дробного порядка. Связь полученного уравнения с конкретной физической моделью указывает на численный алгоритм Монте-Карло для его решения. Важной особенностью модели является изменение плотности энергии локализованных состояний при соблюдении условия детального равновесия между захваченными и делокализованнымии частицами.

Ключевые слова: аномальная диффузия, дробная производная, многократный захват, метод Монте-Карло.

1. Введение

Явления аномальной диффузии наблюдаются в различных материалах и системах [1]. Для описания этих явлений эффективными оказались модели на основе уравнений с дробными производными постоянного порядка [2, 3]. Однако, определенные экспериментальные данные указывают на то, что уравнения дробной диффузии постоянного порядка не обладают достаточной способностью для полного объяснения сложных диффузионных процессов, параметры которых изменяются во времени, пространстве и в зависимости от концентраций. Для преодоления этих ограничений введены уравнения дробной диффузии переменного порядка, в которых порядок дробной производной по времени может зависеть от времени, координат и/или концентрации [4]. Использование таких моделей может быть полезным инструментом для более точного описания и прогнозирования сложных аномальных диффузионных процессов в различных системах. Однако, существуют и некоторые проблемы при использовании уравнений с дробными производными переменного порядка. Во-первых, численное моделирование на основе таких уравнений требует большего количества вычислительных ресурсов. Во-вторых, интерпретация самих уравнений зачастую затруднена. Кроме того, существует потребность в большем числе экспериментальных данных для подтверждения и верификации моделей, основанных на уравнениях с дробными производными переменного порядка.

Временная производная в субдиффузионном уравнении, порядок которой зависит от координаты, может быть объяснена неоднородностью среды, и соответствующее уравнение диффузии можно вывести в рамках модели случайных блужданий с непрерывным временем [5]. В данной работе предложен подход к выводу уравнения с дробной временной производной переменного порядка в рамках модели многократного захвата. Связь этих уравнений с известной физической моделью дисперсионного транспорта подводит к численному алгоритму Монте-Карло для численного реше-

*Работа выполнена в рамках проекта РНФ (грант 22-11-00036).

ния, и допускает формулировку физически обоснованных граничных условий.

2. Модель многократного захвата

Переменный порядок дробной производной в уравнении переноса может связан с вариацией плотности локализованных состояний в модели многократного захвата. Поясним подробнее этот случай. Система кинетических уравнений для модели многократного захвата включает уравнение баланса между локализованными и делокализованными частицами:

$$\frac{\partial p_t(x,t;\varepsilon)}{\partial t} = \omega_\varepsilon \rho(\varepsilon;x,t)\ f(x,t) - \nu_\varepsilon e^{-\dfrac{\varepsilon}{kT}} p_t(x,t;\varepsilon). \tag{1}$$

и уравнение непрерывности

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left[\mu E\ f(x,t) - D\frac{\partial}{\partial x}f(x,t)\right] = N\delta(x)\delta(t), \tag{2}$$

где μ и D – подвижность и коэффициент диффузии делокализованных частиц. Подразумевается начальное условие $p(x,t=0) = N\delta(x)$. Здесь $f(x,t)$ и $p_t(x,t;\varepsilon)$ – концентрации делокализованных и захваченных (локализованных) частиц,

$$p(x,t) = f(x,t) + \int p_t(x,t,\varepsilon)d\varepsilon, \tag{3}$$

а ε – энергия локализованного состояния.

Предполагается, что детальные условия баланса соблюдены. Решение уравнения захвата-эмиссии (1) относительно концентрации локализованных частиц имеет вид:

$$p_t(x,t;\varepsilon) = \int\limits_0^t f(x,\tau)\ \omega_\varepsilon\ \rho(\varepsilon;x,\tau)\ \exp\left\{-\nu_\varepsilon e^{-\dfrac{\varepsilon}{kT}}(t-\tau)\right\} d\tau. \tag{4}$$

После подстановки этого соотношения в уравнение неразрывности получаем

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t}\int\limits_0^t f(x,\tau)\ Q(t-\tau;x,\tau)d\tau + \mu E\frac{\partial f(x,t)}{\partial x} - D\frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial x^2} = N\delta(x)\delta(t).$$

Уравнение содержит интегро-дифференциальный оператор с ядром памяти, не обязательно однородным во времени. В случае пространственной неоднородности он может зависеть от координаты. Выражение для интегрального ядра имеет вид [1]:

$$Q(t-\tau;x,\tau) = \int\limits_0^\infty \omega_\varepsilon \exp\left\{-\nu_\varepsilon(t-\tau)e^{-\varepsilon/kT}\right\}\rho(\varepsilon;x,\tau)d\varepsilon.$$

Подставив в это выражение экспоненциальную плотность состояний с шириной, зависящей от времени и координат, можно получить степенное ядро памяти:

$$Q(t-\tau;x,\tau) \sim \frac{\omega_0\Gamma\left(1+\alpha(x,\tau)\right)}{(\omega_0 N_f/N_t)^{\alpha(x,\tau)}}\ (t-\tau)^{-\alpha(x,\tau)}, \quad t-\tau\to\infty, \quad \alpha(x,\tau) = \frac{kT}{\varepsilon_0(x,\tau)}.$$

Показатель степени этой степенной асимптотики зависит от времени и координат. Подразумевается ограничение $0 < \alpha(x,t) \le 1$.

3. Диффузионное уравнение с производной переменного порядка

После подстановки вышеприведённого ядра памяти приходим к уравнению для концентрации свободных носителей, оно имеет вид дробного уравнения переменного порядка

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} + \omega_0 \frac{\partial}{\partial t} \int\limits_0^t \frac{\pi\alpha(x,\tau)}{\sin \pi\alpha(x,\tau)} \; \frac{f(x,\tau)}{(\nu_0(t-\tau))^{\alpha(x,\tau)}} \frac{d\tau}{\Gamma\left(1-\alpha(x,\tau)\right)} + \\ + \mu E \frac{\partial f(x,t)}{\partial x} - D\frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial x^2} = N\delta(x)\delta(t). \quad (5)$$

Для однородного дробного порядка $\alpha(t)$, зависящего только от времени, уравнение для полной концентрации принимает вид:

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} + \omega_0 \frac{\partial}{\partial t} \int\limits_0^t \frac{\pi\alpha(\tau)}{\sin \pi\alpha(\tau)} \frac{\partial p(x,\tau)}{\partial \tau} \frac{1}{(\nu_0(t-\tau))^{\alpha(\tau)}} \frac{d\tau}{\Gamma\left(1-\alpha(\tau)\right)} + \\ + \mu E \frac{\partial p(x,t)}{\partial x} - D\frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2} = N\delta(x)\delta(t) + N\,\omega_0 \frac{\pi\alpha(0)}{\sin \pi\alpha(0)} \frac{(\nu_0\; t)^{-\alpha(0)}}{\Gamma\left(1-\alpha(0)\right)}.$$

Таким образом, в рамках модели многократного захвата обосновано дробное дифференциальное уравнение диффузии переменного порядка. Уравнение содержит дробную производную по времени, порядок которой может зависеть как от координаты, так и от времени. Зависимость порядка производной от времени и координаты вводится путем изменения ширины распределения локализованных состояний по энергии. Темп локализации зависит от плотности локализованных состояний и изменяется при изменении функции $\rho(\varepsilon; x, t)$. Скорость делокализации, как и прежде, определяется исключительно значением энергии локализованного состояния. В линейном приближении предполагается, что концентрация частиц значительно ниже пространственной плотности ловушек в образце, а энергия ловушки, в которой находится захваченная частица, остаётся неизменной при изменении плотности.

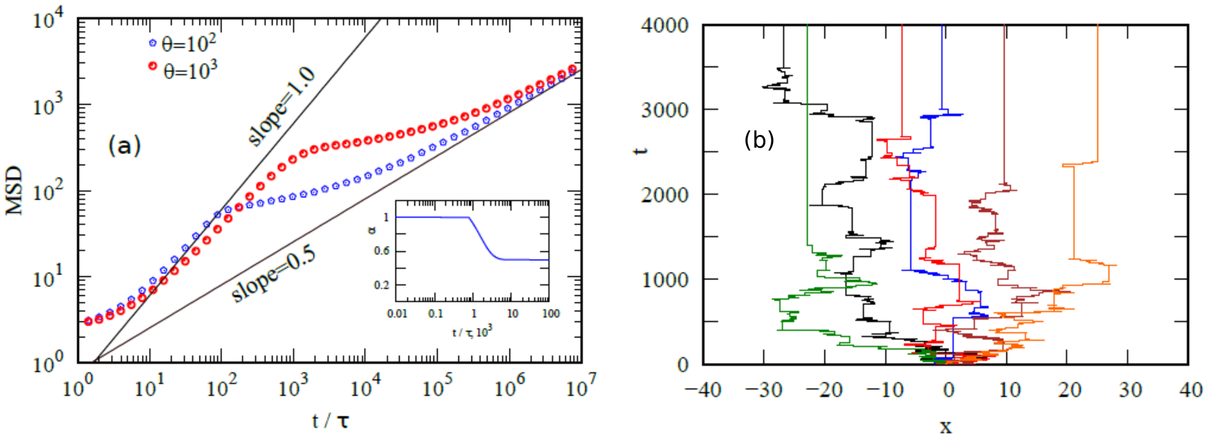
Оператор переменного порядка, полученный в рамках модели, имеет вид

$$D^{\alpha(t)} f(t) = \frac{\partial}{\partial t} \int\limits_0^t \; \frac{f(\tau)}{(t-\tau)^{\alpha(\tau)}} \frac{1}{\Gamma\left(1-\alpha(\tau)\right)} \frac{\pi\alpha(\tau)}{\sin \pi\alpha(\tau)} \, d\tau, \qquad 0 < \alpha(t) \le 1.$$

Предложенный вывод не только привел к определенному виду уравнения с дробной производной переменного порядка, но и позволяет использовать его в качестве основы алгоритма Монте-Карло для численного решения этого уравнения. Алгоритм может быть получен адаптацией алгоритма моделирования многократного захвата [1].

На рис. 1 представлены результаты моделирования методом Монте-Карло процесса дробной диффузии переменного порядка. Вариация порядка задаётся выражением:

$$\alpha = \min\left\{1,\; 2 - \frac{3/2}{1+\exp[(T-t)/\theta)]}\right\} \quad (6)$$



a) b)

Рис. 1. Результаты моделирования дробной диффузии переменного порядка методом Монте-Карло: a) зависимость среднеквадратического смещения от времени для двух интервалов перехода дробного порядка: $1 - \theta = 10^2$; $2 - \theta = 10^3$, зависимость $\alpha(t)$ показана на вставке; b) пространственно-временные траектории частиц для $\theta = 10^3$.

с $T = 10^2$ и $\theta = 10^2$ и 10^3. Показана временная зависимость среднеквадратического смещения для двух ширин перехода $\theta = 10^2$ и $\theta = 10^3$. Зависимость $\alpha(t)$ приведена на вставке. Пространственно-временные траектории частиц для $\theta = 10^3$ и средний квадрат смещения указывают на переход от нормального диффузионного режима к аномальной диффузии (субдиффузии). Аномальный режим определяется нелинейной зависимостью $\langle(\Delta x)^2\rangle \propto t^\gamma$ с $\gamma < 1$ для субдиффузии. Следует отметить, что переходная область характеризуется субдиффузионным показателем, меньшим асимптотического значения. Траектории носителей показывают, что с течением времени распределение времен локализации становится шире и появляются события с более длительными временами локализации. Это связано с уменьшением порядка производной, который согласован с показателем степенного распределения времён локализации в модели случайных блужданий с непрерывным временем [1].

4. Заключение

В рамках модели дисперсионной диффузии с многократным захватом обосновано уравнение с производной переменного дробного порядка. Существенной характеристикой данной модели является изменение плотности энергии локализованных состояний при соблюдении условия детального баланса между локализованными и подвижными частицами. Полученное уравнение переноса с дробной производной переменного порядка может быть полезным для описания переходной аномальной диффузии в гетерогенных материалах, при этом порядок уравнения зависит от выбранного пространственного и/или временного масштаба.

Литература

1. Uchaikin V.V., Sibatov R.T. Fractional Kinetics in Solids. World Scientific, 2013.
2. Uchaikin V.V. Fractional Derivatives for Physicists and Engineers. Springer, 2013.
3. Evangelista L.R., Lenzi E.K. Fractional Diffusion Equations and Anomalous

Diffusion. Cambridge University Press, 2018.

4. Sun, HongGuang, et al. A review on variable-order fractional differential equations: mathematical foundations, physical models, numerical methods and applications. // Fractional Calculus and Applied Analysis. 2019. Vol 22, 1. P. 27.

5. Chechkin A.V., Gorenflo R., Sokolov I.M. Fractional diffusion in inhomogeneous media. // Journal of Physics A: Mathematical and General. 2005. Vol. 38 (42). P. L679.

6. Straka P. Variable order fractional Fokker–Planck equations derived from Continuous Time Random Walks. // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2018. Vol. 503. P. 451.

MSC 82D20

Subdiffusion of variable order: interpretation in terms of the multiple trapping model

R.T. Sibatov[1,2]

Scientific Manufacturing Complex «Technological Centre»[1]
Ulyanovsk State University[2]

Abstract: In the framework of dispersive transport model with multiple trapping, an equation of anomalous diffusion with a variable-order fractional derivative has been substantiated. The relationship between the derived equation and the specific physical model indicates a Monte Carlo numerical algorithm for its solution. A significant feature of the model is the change in the density of energy of localized states under the condition of detailed balance between the trapped and delocalized particles.

Keywords: anomalous diffusion, fractional derivative, multiple trapping, Monte Carlo method.

References

1. Uchaikin V.V., Sibatov R.T. Fractional Kinetics in Solids. World Scientific, 2013.
2. Uchaikin V.V. Fractional Derivatives for Physicists and Engineers. Springer, 2013.
3. Evangelista L.R., Lenzi E.K. Fractional Diffusion Equations and Anomalous Diffusion. Cambridge University Press, 2018.
4. Sun, HongGuang, et al. A review on variable-order fractional differential equations: mathematical foundations, physical models, numerical methods and applications // Fractional Calculus and Applied Analysis. 2019. Vol 22, 1. P. 27.
5. Chechkin A.V., Gorenflo R., Sokolov I.M. Fractional diffusion in inhomogeneous media. // Journal of Physics A: Mathematical and General. 2005. Vol. 38 (42). P. L679.
6. Straka P. Variable order fractional Fokker–Planck equations derived from Continuous Time Random Walks. // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2018. Vol. 503. P. 451.