

# Обобщенный закон Фика для аномальной диффузии в многомерной гребешковой модели

В. Е. Архинчев

Бурятский научный центр Сибирского отд. РАН, 670047 Улан-Удэ, Россия

Поступила в редакцию 16 августа 2007 г.

Рассмотрена задача многомерной диффузии в рамках гребешковой модели. Для случая аномальных субдиффузионных случайных блужданий показано, что диффузионный ток описывается обобщенным законом Фика, в которое вместо обычного коэффициента входит тензор диффузии. Необычным оказывается вид компонент тензора диффузии, которые имеют операторный вид как производные по времени дробного порядка. Степень порядка показателя дробности оказывается разной для разных направлений.

PACS: 05.40.Fb, 05.60.Cd

**1. Введение.** Как известно, стохастический транспорт в неупорядоченных системах интенсивно изучается в последнее время. Это связано как с аномальным характером транспорта в этих системах, так и с возможными многочисленными приложениями [1–3]. Одним из наиболее известных примеров аномального транспорта являются случайные блуждания на перколяционных кластерах, которые носят субдиффузионный характер:

$$\langle x^2(t) \rangle \propto t^{2/d_w}. \quad (1)$$

Здесь  $d_w$  – критический индекс аномальной диффузии ( $d_w > 2$ ). В целом, к настоящему моменту сложилось общее представление о необходимости использования устойчивых распределений негауссовского вида и математического аппарата дробных производных и интегралов для описания аномального стохастического транспорта [4–6]. В частности, было показано, что при описании субдиффузионных стохастических процессов возникают эффективные диффузионные уравнения дробного порядка по времени [7, 8]. В работе [9] в рамках гребешковой модели было выведено уравнение диффузии с дробной производной по времени порядка  $1/2$ , описывающее диффузию вдоль оси гребешковой структуры:

$$\frac{\partial^{1/2} N(x, t)}{\partial t^{1/2}} = \tilde{D} \frac{\partial^2 N(x, t)}{\partial x^2}. \quad (2)$$

Следует отметить, что гребешковая модель является одной из немногих точно решаемых моделей с субдиффузионным характером, поэтому она использовалась многими исследователями [10–14]. Например, гребешковая модель была использована при исследованиях массо-переноса в живых организмах и роста раковых клеток [15–17]. Необходимо отметить,

что аналогичные эффективные уравнения дробного порядка возникают также при описании транспорта пассивного скаляра в задачах переноса [18–20]. В работе [21] было показано, что решения эффективных уравнений дробного порядка существенно зависят от начальных условий.

В настоящей работе выполнено исследование анизотропных случайных блужданий на многомерной гребешковой структуре. Проблема заключается в том, что в отличие от анизотропных случайных блужданий при обычной диффузии анизотропные случайные блуждания на многомерной гребешковой структуре имеют различные степенные зависимости [22, 23]. В двумерном случае критические индексы равны

$$d_{w_x} = 4, \quad d_{w_y} = 2. \quad (3)$$

В трехмерном случае гребешковой структуры эти индексы принимают иные значения:

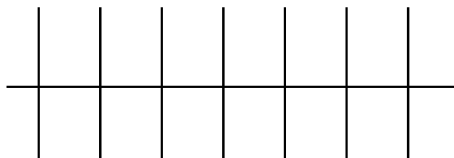
$$d_{w_x} = 8, \quad d_{w_y} = 4, \quad d_{w_z} = 2. \quad (4)$$

Различные степенные зависимости среднеквадратичного диффузионного смещения вдоль разных координат означают также и различные автомодельные поведения вдоль этих координат, которые при раздельном рассмотрении вдоль каждого направления описываются соответствующими уравнениями дробного порядка типа (2). Поэтому возникает вопрос – возможно ли унифицированное описание анизотропных субдиффузионных случайных блужданий на гребешковой структуре? И если да, то каким должно быть искомое обобщенное диффузионное уравнение, описывающее унифицированным образом анизотропную аномальную диффузию на многомерной гребешковой структуре?

Целью настоящей работы является развитие подхода для описания анизотропных субдиффузионных случайных блужданий и вывод обобщенного диффузионного уравнения для исследуемого случая. Получено обобщение известного закона Фика для обычной диффузии [24]  $\mathbf{j}_d = -D\nabla n$  на случай анизотропной многомерной диффузии в рамках гребешковой модели. Показано, что в этом случае возникает эффективный тензор диффузии, компоненты которого имеют операторный вид и содержат производные по времени дробного вида. Получены асимптотические уравнения диффузии для анизотропного многомерного случая.

Статья построена следующим образом. В разд.2 обсуждается кратко гребешковая модель. В рамках модели выведено эффективное уравнение дробного порядка, построено решение для диффузии вдоль оси гребешковой структуры. В разд.3 получено обобщение закона Фика для двухмерного случая. В разд.4 выведено эффективное уравнение диффузии для анизотропной диффузии в трехмерном случае и получено трехмерное обобщение закона Фика для анизотропных аномальных случайных блужданий. В заключение дано краткое обсуждение полученных результатов и сравнение с результатами, полученными ранее.

**2. Диффузия в модели гребешковой структуры.** Напомним коротко гребешковую модель. Впервые она была введена для описания субдиффузии на перколяционных кластерах [22, 23]. Она состоит из хорошо проводящей оси (аналог скелета перколяционного кластера) и ребер, прикрепленных к оси, см. рисунок.



Гребешковая модель: ось и ребра, прикрепленные к оси структуры

Особенность диффузии в гребешковой структуре состоит в возможности смещения по  $x$ -направлению только вдоль оси структуры (при  $y = 0$ ). Это означает, что коэффициент диффузии  $D_{xx}$  отличен от нуля только при  $y = 0$ :

$$D_{xx} = D_1\delta(y), \quad (5)$$

то есть  $x$ -компонента диффузионного тока равна

$$J_x = -D_{xx} \frac{\partial N}{\partial x}. \quad (6)$$

Диффузия вдоль осей структуры носит обычный характер:  $D_{yy} = D_2$ . Следовательно, случайные блуждания на гребешковой структуре описываются тензором диффузии:

$$D_{ij} = \begin{pmatrix} D_1\delta(y) & 0 \\ 0 & D_2 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Используя закон Фика [24] с тензором диффузии (7)

$$\mathbf{J}_d = \hat{D}\nabla N, \quad (8)$$

получим диффузионное уравнение

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} - D_1\delta(y) \frac{\partial^2}{\partial x^2} - D_2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) G(x, y, t) = \delta(x)\delta(y)\delta(t). \quad (9)$$

Здесь  $G(x, y, t)$  – функция Грина уравнения диффузии. Для дальнейшего удобства сделаем преобразование Лапласа по времени и преобразование Фурье по  $x$ -координате:

$$\left[ s + D_1 k_x^2 \delta(y) - D_2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] G(s, k_x, y) = \delta(y). \quad (10)$$

В качестве начальных данных используется точечный источник  $\delta(x)\delta(y)\delta(t)$ . Решение уравнения (10) будем искать в виде

$$G(s, k, y) = g(s, k) \exp(-\lambda|y|). \quad (11)$$

Подставляя решение (11) в уравнение (10), получим две части: регулярное выражение и выражение с сингулярным коэффициентом  $\delta(y)$

$$[s - D_2\lambda^2]G(s, k_x, y) = 0, \quad (12a)$$

$$[D_1 k^2 + 2\lambda D_2]\delta(y)g(s, k, y) = \delta(y). \quad (12b)$$

Из первого уравнения (12a) мы определим значение параметра  $\lambda$ , а из второго уравнения (12b) – выражение для функции  $g(s, k)$ :

$$\lambda = \sqrt{\frac{s}{D_2}}, \quad g(s, k_x) = \frac{1}{2D_2\lambda + D_1 k_x^2}. \quad (13)$$

Сделав обратное преобразование Фурье, получим выражение для функции Грина:

$$G(x, y, t) = \int_0^\infty (\tau + |y|) \times \exp\left(-\frac{x^2}{4D_1\tau} - \frac{D_2(\tau + |y|)^2}{4t}\right) \frac{\partial \tau \sqrt{D_2^3}}{\pi \sqrt{D_1 t^3 \tau}}. \quad (14)$$

При получении этого выражения было использовано тождество

$$\int_0^{\infty} \exp(-\alpha\tau) d\tau = \frac{1}{\alpha}. \quad (15)$$

Нетрудно проверить, что среднеквадратичное смещение вдоль оси структуры оказывается аномальным:

$$\langle x^2(t) \rangle = D_1 \sqrt{t/D_2}. \quad (16)$$

Диффузия вдоль ребер гребешковой структуры носит обычный характер:

$$\langle y^2(t) \rangle = 2D_2t. \quad (17)$$

Таким образом, анизотропные случайные блуждания описываются различными степенными зависимостями (16) и (17), см. также [23]. В связи с этим и возникает вопрос об унифицированном описании анизотропных случайных блужданий с различными степенными зависимостями. Решению этого вопроса и посвящен следующий раздел.

**3. Обобщение закона Фика в двумерном случае.** Чтобы получить обобщенное уравнение диффузии в двумерном случае, рассмотрим подробнее решение (11). Для этого сделаем фурье-преобразование этого решения по координате  $y$ :

$$G(s, k_x, k_y) = \frac{2\lambda_y}{(2D_2\lambda + D_1k^2)(\lambda^2 + k_y^2)}. \quad (18)$$

Соответственно, получим следующее уравнение диффузии для анизотропных случайных блужданий на гребешковой структуре:

$$(2D_2\lambda + D_1k^2) \left( \frac{\lambda}{2} + \frac{k_y^2}{2\lambda} \right) \rho(s, k_x, k_y) = 0. \quad (19)$$

Пренебрегая в полученном уравнении произведением  $(k_x^2 \times k_y^2)$  (это возможно на больших масштабах), получим следующее эффективное уравнение в  $(s, k_x, k_y)$  – представлении:

$$\left( s + \frac{D_1}{2} k_x^2 \sqrt{\frac{s}{D_2}} + D_2 k_y^2 \right) \rho(s, k_x, k_y) \approx 0. \quad (20)$$

Возвращаясь в обычное  $(x, y, t)$ -представление, получим эффективное уравнение диффузии:

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} - \frac{D_1}{2\sqrt{D_2}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{\partial^{\frac{1}{2}}}{\partial t^{\frac{1}{2}}} - D_2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \rho(s, k_x, k_y) = 0. \quad (21)$$

Таким образом получим операторное выражение для эффективного тензора диффузии в обобщенном законе Фика:

$$\hat{D}_{\text{eff}} = \begin{pmatrix} \frac{D_1}{2\sqrt{D_2}} \frac{\partial^{1/2}}{\partial t^{1/2}} & 0 \\ 0 & D_2 \end{pmatrix}. \quad (22)$$

**4. Трехмерное обобщение закона Фика.** В случае трехмерной гребешковой структуры случайное блуждание будет описываться тензором диффузии в следующем виде:

$$D_{ij} = \begin{pmatrix} \tilde{D}_1 \delta(y) \delta(z) & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{D}_2 \delta(z) & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{D}_3 \end{pmatrix}. \quad (23)$$

Соответственно, получается следующее диффузионное уравнение:

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} - \tilde{D}_1 \delta(y) \delta(z) \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \tilde{D}_2 \delta(z) \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \tilde{D}_3 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \times G(t, x, y, z) = \delta(x) \delta(y) \delta(z) \delta(t). \quad (24)$$

Решение трехмерной задачи будем искать в виде, аналогичном (11):

$$G(s, k_x, y, z) = g(s, k_x) \exp(-\lambda_y |y| - \lambda_z |z|). \quad (25)$$

Подставляя решение (25) в уравнение (29), определим параметры  $\lambda_y$ ,  $\lambda_z$  и выражение для функции  $g(s, k_x)$ :

$$\lambda_z = \sqrt{\frac{s}{D_2}}, \quad \lambda_y = \sqrt{\frac{2\tilde{D}_3 \lambda_z}{\tilde{D}_2}}, \quad g(s, k) = \frac{1}{2\tilde{D}_2 \lambda + \tilde{D}_1 k^2}. \quad (26)$$

Совершив преобразования Фурье по координатам  $y$  и  $z$ , получим функцию Грина для трехмерного случая:

$$G(k_x, k_y, k_z, s) = \frac{4\lambda_y \lambda_z}{(2\tilde{D}_2 \lambda + \tilde{D}_1 k_x^2)(\lambda_y^2 + k_y^2)(\lambda_z^2 + k_z^2)}. \quad (27)$$

Повторяя приведенные выше рассуждения, получим эффективное уравнение диффузии для трехмерного анизотропного случая:

$$\left( s + \frac{\tilde{D}_1}{2} \frac{\sqrt{s}}{\sqrt{\tilde{D}_3 \tilde{D}_2^2}} k_x^2 + 2\tilde{D}_2 \sqrt{\frac{s}{\tilde{D}_3}} k_y^2 + \tilde{D}_3 k_z^2 \right) \times \rho(s, k_x, k_y, k_z) \approx 0. \quad (28)$$

Или в обычном представлении:

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\tilde{D}_1}{2\sqrt{\tilde{D}_3\tilde{D}_2}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{\partial^{3/4}}{\partial t^{3/4}} - \frac{2\tilde{D}_2}{\sqrt{\tilde{D}_3}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{\partial^{1/2}}{\partial t^{1/2}} - \tilde{D}_3 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \rho(s, k_x, k_y, k_z) \approx 0. \quad (29)$$

Следовательно, эффективный тензор диффузии в законе Фика для трехмерного анизотропного блуждания на гребешковой структуре имеет вид

$$\hat{D}_{\text{eff}} = \begin{pmatrix} \frac{\tilde{D}_1}{2\sqrt{\tilde{D}_3\tilde{D}_2}} \frac{\partial^{3/4}}{\partial t^{3/4}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2\tilde{D}_2}{\sqrt{\tilde{D}_3}} \frac{\partial^{1/2}}{\partial t^{1/2}} & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{D}_3 \end{pmatrix}. \quad (30)$$

**5. Заключение.** Таким образом, показано, что аномальное случайное блуждание на многомерной гребешковой структуре в асимптотическом пределе больших времен (больших масштабов) описывается эффективными диффузионными уравнениями, содержащими помимо обычных пространственных производных также и производные по времени дробного порядка. Иными словами, эффективный тензор диффузии в законе Фика приобретает операторный вид, см. формулы (22) и (30), при этом степень дробной производной по времени разная для различных направлений. Такое необычное представление связано с аномальным субдиффузионным характером случайных блужданий на многомерной гребешковой структуре. По-видимому, такое операторное представление для тензора диффузии в случае анизотропных аномальных случайных блужданий ранее не было получено.

Наши результаты существенно отличаются от результатов работ [25, 26], в которых исследование аномальных случайных блужданий на гребешковой структуре основано на использовании коэффициента диффузии, зависящего как от координат, так и от времени степенным образом. Такой подход, предложенный в работе [27], на наш взгляд представляется неточным, поскольку нарушает симметрию и однородность среды – появляются сингулярные точки, связанные с началом координат и началом блуждания. Авторы считают, что усреднение по ансамблю начальных точек и времен блужданий снимает это

возражение, но мы полагаем, что симметрия должна исходно содержаться в эффективных уравнениях, а не привноситься извне путем дополнительного усреднения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант # 05-02-97201).

1. M. B. Isichenko, *Rev. Mod. Phys.* **64**, 961 (1992).
2. J. Klafter and R. Metzler, *Phys. Rep.* **339**, 1 (2000).
3. R. Metzler and J. Klafter, *Adv. in Chem. Physics* **116**, 223 (2001).
4. S. G. Samko, A. A. Kilbas, and O. I. Marichev, *Fractional integrals and derivatives. Theory and Applications*, Gordon and Breach, Amsterdam, 1993.
5. *Applications of fractional calculus in physics*, Ed. R. Hilfer, World Scientific, 2000.
6. В. В. Учайкин, *ЖЭТФ* **97**, 810 (2003).
7. R. R. Nigmatullin, *Physica Stat. Sol.* **133**, 425 (1986).
8. Р. Р. Нигматуллин, *ТМФ* **90**, 354 (1992).
9. В. Е. Архинчев, Э. М. Баскин, *ЖЭТФ* **73**, 161 (1991).
10. В. Е. Архинчев, *ЖЭТФ* **88**, 710 (1999).
11. V. E. Arkhincheev, *Physica A* **280**, 304 (2002).
12. V. E. Arkhincheev, *Physica A* **307**, 131 (2002).
13. Ю. Лубашевский, А. Землянинов, *ЖЭТФ*, (1996).
14. A. M. Reynolds, *Physica A* **334**, 39 (2004).
15. E. Baskin and A. Iomin, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 120603 (2004).
16. A. Iomin and E. Baskin, *Phys. Rev. E* **71**, 061101 (2005).
17. A. Iomin, *J. of Physics* **7**, 57, 2005.
18. А. В. Гордеев, А. В. Гречиха, Я. Л. Калда, *Физика плазмы* **10**, 96 (1990).
19. К. В. Чукбар, *ЖЭТФ* **109**, 1335 (1996).
20. В. Ю. Забурдаев, К. В. Чукбар, *ЖЭТФ* **121**, 299 (2002).
21. В. Ю. Забурдаев, К. В. Чукбар, *Письма в ЖЭТФ* **77**, 654 (2003).
22. S. White and M. Barma, *J. Phys. A* **17**, 2995 (1984).
23. G. Weiss and S. Havlin, *Physica A* **134**, 474 (1986).
24. A. Fick, *Ann. Phys. (Leipzig)* **170**, 50 (1855).
25. D. Campos, V. Mender, and J. Fort, *Phys. Rev. E* **69**, 031115 (2004).
26. S. Sellers and J. A. Barker, *Phys. Rev. E* **74**, 061103 (2006).
27. B. O'Shaughnessy and I. Procaccia, *Phys. Rev. A* **32**, 3073 (1985).