

МОДЕЛЬ АНОМАЛЬНОГО СТОХАСТИЧЕСКОГО ПЕРЕНОСА

*В. П. Шкилев**

*Институт химии поверхности Национальной академии наук Украины
03164, Киев, Украина*

Поступила в редакцию 25 февраля 2005 г.

В рамках решеточной модели выведена система уравнений, позволяющая описывать процессы аномального стохастического переноса при малых концентрациях переносимого вещества. Установлено, что в принятой модели причиной аномального переноса является неравновесное распределение частиц по узлам неоднородной решетки. Показано, что при определенных дополнительных предположениях из полученной системы уравнений может быть выведено известное уравнение с дробной производной по времени.

PACS: 05.40.Fb

1. ВВЕДЕНИЕ

Процессы переноса во многих физических системах проявляют аномальные свойства [1–3]. Хотя для теоретического описания таких процессов предлагались различные подходы, в настоящее время удовлетворительное решение проблемы отсутствует [4–7]. В данной работе предлагается новый подход, суть которого заключается в строгом выводе макроскопического транспортного уравнения из основного кинетического уравнения без использования предположения о локально равновесном распределении частиц по узлам разного типа.

Имеются работы, в которых рассматривались системы уравнений, сходные с предлагаемой в данной работе [8–11]. Однако в них использовался феноменологический подход, поэтому связь параметров уравнений с микроскопическими величинами не была установлена. Кроме того, важными отличиями системы уравнений, предлагаемой в данной работе, являются симметричность по отношению к разным типам узлов и связанная с этим простота, позволяющие более эффективно использовать для ее изучения аналитические методы.

2. СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ

В данном разделе в рамках решеточной модели выводится система дифференциальных уравнений

относительно парциальных концентраций молекул, находящихся в узлах разного типа. В ходе вывода используются следующие предположения: среда, в которой проходит процесс переноса макроскопически однородна и изотропна; имеется конечное число различных типов узлов, расположенных хаотическим образом; макроскопический перенос является результатом миграции частиц по узлам решетки посредством активированных скачков в близлежащие узлы; скорости переходов представимы в виде произведения двух функций, одна из которых зависит только от типа узла, из которого совершается скачок, а другая — только от типа узла, в который совершается скачок. Последнее предположение выполняется, например, в простой модели случайных ловушек, а также в предложенной в работе [12] более сложной модели, которая учитывает вариации высоты потенциального барьера, разделяющего узлы.

В рамках решеточной модели выражение для потока частиц, приходящегося на единицу площади некоторой плоской поверхности, может быть записано в виде

$$q = \frac{1}{S} \sum_n \sum_m (W_{nm} P_m - W_{mn} P_n), \quad (1)$$

где S — площадь поверхности. Суммирование в формуле (1) ведется по таким парам узлов, для которых, во-первых, возможен обмен частицами, во-вторых, прямая, их соединяющая, пересекает рассматриваемую поверхность. Поскольку рассматриваются только

*E-mail: shkilev@ukr.net

ко малые концентрации, вероятности перехода W_{nm} не зависят от вероятностей заполнения узлов P_n .

Рассматривая вероятности, относящиеся к узлам разных типов, в качестве непрерывных дифференцируемых функций, предполагая, что частицы могут совершать скачки только малой длины и что размеры рассматриваемой поверхности малы, можем записать приближенные выражения для вероятностей:

$$P_k \approx P_i + \mathbf{r}_{ok} \cdot \nabla P_i, \quad (2)$$

где P_k — вероятность заполнения произвольного узла k , лежащего в окрестности рассматриваемой поверхности и относящегося к i -му типу; P_i — вероятность заполнения узла i -го типа в центре поверхности; \mathbf{r}_{ok} — радиус-вектор, соединяющий центр поверхности с узлом k .

Предполагая, что размеры рассматриваемой поверхности достаточно велики, для того чтобы корреляциями в расположении узлов, участвующих в обмене частицами через эту плоскость, можно было пренебречь, подставляя выражения (2) в (1) и проводя преобразования, получим следующее выражение для вектора потока:

$$\mathbf{J} = - \sum_{i=1}^N (-\mathbf{F} B_i \rho_i + D_i \nabla \rho_i). \quad (3)$$

Здесь N — число типов узлов;

$$D_i = \frac{2h_i}{N_i} \sum_n \sum_{m \in i} h_{om} W_{nm}, \quad (4)$$

$$B_i = \frac{2h_i}{N_i} \sum_n \sum_{m \in i} \alpha_{nm} h_{nm} W_{nm}$$

— соответственно, коэффициент диффузии и подвижность, относящиеся к узлам i -го типа; h_{om} и h_{nm} — длины проекций векторов \mathbf{r}_{om} и \mathbf{r}_{nm} на нормаль к поверхности; $\rho_i = P_i/V_i$ — концентрации частиц, расположенных в узлах i -го типа; V_i — средний объем, приходящийся на один узел i -го типа; h_i — максимальная длина скачка для частиц, находящихся в узлах i -го типа; N_i — количество узлов i -го типа, располагающихся в прямоугольном параллелепипеде с основанием S и высотой h_i . Предполагается, что в присутствии слабого поля вероятности W_{nm} получают небольшие приращения:

$$W_{nm}^F = W_{nm} [1 - \alpha_{nm} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{r}_{nm})], \quad (5)$$

где W_{nm}^F — вероятность перехода в присутствии поля; α_{nm} — положительный коэффициент, величина

которого зависит от рельефа функции потенциальной энергии в окрестности узлов n и m ; \mathbf{F} — сила, действующая на частицу.

Если частицы распределяются по узлам разного типа равновесным образом, то выражение (3) сводится к стандартному выражению для вектора потока. Однако в общем случае оно будет давать результаты, принципиально отличающиеся от классических. В частности, конвективный поток не будет пропорционален суммарной концентрации частиц, а вектор диффузионного потока не будет параллелен градиенту суммарной концентрации. Аналогичное выражение для вектора потока предлагалось в работе [10] в рамках феноменологического подхода. Но в [10] суммирование проводилось не по типам узлов, а по неким, четко не определенным, «диффузионным путям».

Используя полученное выражение для вектора потока, уравнение неразрывности можно записать следующим образом:

$$\frac{\partial \rho(r, t)}{\partial t} = \sum_{i=1}^N [-B_i (\mathbf{F} \cdot \nabla \rho_i(r, t)) + D_i \nabla^2 \rho_i(r, t)], \quad (6)$$

где

$$\rho = \sum_{i=1}^N \rho_i$$

— суммарная концентрация частиц.

Для того чтобы получить замкнутую систему уравнений, к уравнению (6) необходимо добавить уравнения, описывающие изменение парциальных концентраций со временем. Для вывода таких уравнений используем основное кинетическое уравнение

$$\frac{\partial P_n}{\partial t} = \sum_m (W_{nm} P_m - W_{mn} P_n). \quad (7)$$

Будем предполагать, что скорость перехода может быть представлена в виде произведения функции, зависящей только от типа узла, с которого совершается скачок, на функцию, зависящую только от типа узла, в который совершается скачок: $W_{nm} = U_i V_j$, где индекс i указывает тип узла m , а индекс j — тип узла n . Обозначим через α_i долю узлов i -го типа в макроскопическом объеме среды. Выделим в среде ячейку, малую в макроскопическом смысле, но достаточно большую, для того чтобы в этой ячейке узлы решетки были распределены по тому же закону, что и во всем объеме среды, т. е. чтобы доля узлов i -го типа в ячейке была равна α_i . Суммируя уравнения (7) по выделенной ячейке для каждого типа

узлов отдельно и деля на объем ячейки, получим уравнения

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -\rho_i V_i \sum_{j=1}^N \alpha_j U_j + \frac{1}{V} \sum_{n \in i} \sum_m W_{nm} P_m, \quad (8)$$

$$i = 1, 2, \dots, N.$$

Произведения $\alpha_j U_j$ показывают, в какой пропорции частицы, совершающие скачки, распределяются по узлам разного типа. В силу хаотического расположения узлов эти пропорции не зависят от того, с каких узлов совершаются скачки. Отсюда следует, что второй член в уравнении (8) можно записать в виде произведения некоторой постоянной величины, не зависящей от типа узла i , на множитель $\alpha_i U_i$. Указанную постоянную величину можно найти, суммируя уравнения (8) и сравнивая полученное уравнение с уравнением неразрывности. В результате получим уравнения

$$\frac{\partial \rho_i(r, t)}{\partial t} = -\nu_i \rho_i(r, t) + \gamma_i G(r, t), \quad (9)$$

$$i = 1, 2, \dots, N,$$

где

$$G(r, t) = \sum_{j=1}^N \nu_j \rho_j(r, t) + \sum_{i=1}^N \{ -B_i (F \cdot \nabla \rho_i(r, t)) + D_i \nabla^2 \rho_i(r, t) \}, \quad (10)$$

$$\gamma_i = \frac{\alpha_i U_i}{\sum_{j=1}^N \alpha_j U_j}, \quad \nu_i = V_i \sum_{j=1}^N \alpha_j U_j. \quad (11)$$

Параметры γ_i показывают, какая доля частиц, совершающих скачки, попадает в узлы i -го типа, а параметры ν_i характеризуют частоту, с которой совершают скачки частицы, находящиеся в узлах i -го типа.

Аналогичная система уравнений была выведена в работе [12], однако вывод, использованный в [12], с физической точки зрения неудовлетворителен. В частности, смысл функции, задающей вероятности переходов, остался неясным. Вначале она была определена как функция, описывающая скорость обмена частицами между физически малыми, но содержащими большое число узлов, объемами. Впоследствии выяснилось, что эта функция одновременно описывает и скорость установления равновесного распределения частиц по узлам разного типа внутри физически малого объема. Каким образом это

происходит, становится понятным только в результате детального рассмотрения процесса переноса на микроскопическом уровне.

3. СООТНОШЕНИЯ ЭЙНШТЕЙНА

В данном разделе выводятся соотношения Эйнштейна, связывающие подвижности и коэффициенты диффузии, относящиеся к отдельным типам узлов. В рамках решеточной модели эти соотношения удается доказать только при дополнительном предположении, что пары узлов, между которыми совершаются скачки, разделены узким потенциальным барьером, расположенным точно посередине между узлами. Поскольку такое предположение в случае неупорядоченной среды нереалистично, здесь эти соотношения выводятся вне рамок решеточной модели. Для этого вначале выводится соотношение Грина–Кубо, связывающее среднее смещение частиц при наличии внешнего поля со среднеквадратичным смещением в отсутствие поля. При этом, поскольку в рассматриваемом случае стандартные предположения не удовлетворяются, используются более слабые предположения. Во-первых, предполагается, что в невозмущенном движении равновесным образом распределены только скорости. Во-вторых, предположение, что скорость отдельной частицы в невозмущенном движении представляет собой стационарный стохастический процесс, не используется.

Рассмотрим процесс расширения облака частиц, в начальный момент времени сосредоточенного в начале координат. Движение частиц будем считать классическим. Будем предполагать, что распределение частиц по скоростям быстро релаксирует к равновесному распределению. Тогда в ходе процесса функция распределения изолированной системы, включающей в себя мигрирующие частицы и среду, в которой происходит миграция, будет иметь вид произведения некоторого зависящего от времени распределения по обобщенным координатам на равновесное распределение по обобщенным импульсам:

$$f_0(q, p, t) = f_1(q, t) f_e(p). \quad (12)$$

Предположим, что при наличии возмущения распределение по скоростям быстро релаксирует к стационарному распределению, мало отличающемуся от равновесного. Тогда в присутствии возмущения функцию распределения можно записать в виде

$$f(q, p, t) = f_2(q, t) (f_e(p) + \delta f(p)), \quad (13)$$

где δf — малая поправка; $f_2(q, t)$ — функция, которая может сильно отличаться от функции $f_1(q, t)$. Отметим, что, хотя распределения мигрирующих частиц по пространству в возмущенном и невозмущенном движениях будут различаться сильно, распределения частиц по узлам разных типов будут одинаковыми. Это следует из однородности и изотропности среды и хаотического расположения узлов. Поскольку внешнее поле предполагается слабым, оно не будет влиять на частоту совершения скачков и на вероятности попадания частиц в узлы разных типов, а будет приводить лишь к смещению частиц в определенном направлении.

Проводя стандартные преобразования [13], получим следующее выражение для среднего значения изменения произвольной фазовой функции $B(q, p)$ в возмущенном процессе:

$$\langle \Delta B \rangle(t) = \int_0^t \int \{ \Delta H, f_2(q, t') f_e(p) \} \times \\ \times B(q_t(q, p), p_t(q, p)) dt' d\Gamma. \quad (14)$$

Здесь $\{ \dots, \dots \}$ — скобки Пуассона; $d\Gamma$ — элемент объема в фазовом пространстве, $q_t(q, p)$, $p_t(q, p)$ — фазовые координаты в момент времени t точки, которая сносится фазовым потоком, соответствующим гамильтониану невозмущенной системы H , и которая в момент времени t' имеет фазовые координаты q, p ; ΔH — гамильтониан малого возмущения, наложенного на систему.

Если направить ось x вдоль вектора внешней силы, то интересующие нас гамильтониан возмущения и динамическая переменная будут иметь вид

$$\Delta H = \sum_i F x_i, \quad B = \sum_i V_{xi}, \quad (15)$$

где x_i — x -координата i -й мигрирующей частицы; F — величина приложенной силы; V_{xi} — x -компонента скорости i -й мигрирующей частицы.

Учитывая, что при малых концентрациях скорости разных частиц не коррелируют и распределение по импульсам, $f_e(p)$, максвелловское, в результате подстановки выражений (15) в (14) получим:

$$\langle V_x \rangle^F(t) = \frac{F}{kT} \int_0^t \langle V_x(t) V_x(t') \rangle^0 dt'. \quad (16)$$

Угловыми скобками с верхним индексом F здесь обозначено среднее значение в присутствии силы, а угловыми скобками с верхним индексом 0 — среднее

значение в невозмущенном движении. Корреляционная функция, стоящая под знаком интеграла, соответствует невозмущенному движению, определяемому функцией распределения (12). Действительно, во-первых, скорости $V_x(t')$ и $V_x(t)$ связаны друг с другом через фазовый поток, соответствующий невозмущенному гамильтониану H . Во-вторых, скорость $V_x(t)$ зависит только от скорости $V_x(t')$ и от типа узла, в котором находится частица в момент времени t' , она не зависит от точного положения частицы в пространстве. Следовательно, поскольку функции $f_1(q, t)$ и $f_2(q, t)$ дают одно и то же распределение частиц по узлам разного типа, функцию $f_2(q, t)$ в формуле (14) можно заменить на функцию $f_1(q, t)$.

Интегрируя выражение (16), получим соотношение Грина — Кубо

$$\langle \Delta x \rangle^F = \frac{F}{6kT} \langle \Delta r^2 \rangle^0, \quad (17)$$

с помощью которого можно получить соотношения Эйнштейна,

$$D_i = \frac{D_i}{kT}, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (18)$$

Для этого нужно вычислить средние значения $\langle \Delta x \rangle^F$ и $\langle \Delta r^2 \rangle^0$, используя систему уравнений (9), (10), и потребовать, чтобы соотношение (17) удовлетворялось при любых распределениях частиц по узлам разного типа.

4. УРАВНЕНИЕ ЭВОЛЮЦИИ КОНЦЕНТРАЦИОННОГО ПРОФИЛЯ

Далее для простоты будем предполагать, что средняя длина скачка для молекул, находящихся в узлах всех типов, одна и та же. При таком условии коэффициенты диффузии выражаются в виде

$$D_i = c\nu_i, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (19)$$

где c — константа, по порядку величины равная среднему квадрату длины скачка. Такое предположение оправдано, так как основной вклад в вариации коэффициентов диффузии обычно дают частотные множители ν_i .

Подставляя соотношения (18) и (19) в систему уравнений (9), (10) и переходя от переменной t к переменной Лапласа u , приведем эту систему уравнений к одному уравнению:

$$u\rho(r, u) - \rho^0(r) = \\ = \frac{u\psi}{1-\psi} cO\rho(r, u) + \frac{\varphi-\psi}{1-\psi} cO\rho^0(r), \quad (20)$$

где

$$O = \nabla^2 - \frac{\mathbf{F} \cdot \nabla}{kT}$$

— оператор Фоккера–Планка,

$$\psi(u) = \sum_{i=1}^N \frac{\gamma_i \nu_i}{\nu_i + u}, \quad \varphi(u) = \sum_{i=1}^N \frac{\beta_i \nu_i}{\nu_i + u}, \quad (21)$$

$\beta_i = \rho_i^0(r)/\rho^0(r)$ — доля частиц, находящихся в точке r в момент времени $t = 0$ в узлах i -го типа.

Совершить обратный переход от переменной Лапласа к физическому времени можно путем разложения функций $u\psi/(1-\psi)$ и $(\varphi-\psi)/(1-\psi)$ на простейшие дроби. В результате получается интегро-дифференциальное уравнение, описывающее эволюцию суммарной концентрации частиц в переменных r, t :

$$\frac{\partial \rho(r, t)}{\partial t} = a_0 c O \rho(r, t) + \int_0^t \sum_{i=1}^{N-1} a_i \exp[-\lambda_i(t-t')] \times \\ \times c O \rho(r, t') dt' + \sum_{i=1}^{N-1} b_i \exp(-\lambda_i t) c O \rho^0(r), \quad (22)$$

где $-\lambda_i$ ($i = 1, 2, \dots, N-1$) — отличные от нуля корни уравнения $\psi(u) = 1$; a_i и b_i — коэффициенты, выражающиеся через параметры функций $\psi(u)$ и $\varphi(u)$.

Решение уравнения (22) может быть представлено в виде разложения в ряд по собственным функциям $X_n(r)$ оператора cO :

$$\rho(r, t) = X_0(r) + \sum_{n=1}^{\infty} T_n(t) X_n(r). \quad (23)$$

Функции $T_n(t)$, характеризующие скорость затухания соответствующих собственных функций, представляются в виде линейных комбинаций экспоненциальных функций.

5. РЕШЕТКА С ДВУМЯ ТИПАМИ УЗЛОВ

В данном разделе на примере решетки с двумя типами узлов будет показано, что уравнение (22) может описывать процессы аномального переноса. Под аномальным переносом здесь понимаются такие режимы переноса, при которых среднее смещение частиц в присутствии поля либо среднее квадратичное смещение в отсутствие поля являются нелинейными функциями времени в макроскопическом диапазоне изменения этих величин. Чтобы упростить физическую интерпретацию формул, мы рассмотрим

модель случайных ловушек, в которой параметры γ_i равны параметрам α_i .

Из уравнения (22) следует, что если имеется только два типа узлов, то выражение для среднее квадратичного смещения в отсутствие внешнего поля выглядит следующим образом:

$$\langle r^2 \rangle^0 = 6D \left\{ t + (b-1)\tau \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \right] \right\}, \quad (24)$$

где

$$\tau = \frac{\tau_1 \tau_2}{\xi}, \quad a = \xi \left(\frac{\alpha_1}{\tau_1} + \frac{\alpha_2}{\tau_2} \right), \quad b = \xi \left(\frac{\beta_1}{\tau_1} + \frac{\beta_2}{\tau_2} \right),$$

$$\xi = \alpha_1 \tau_1 + \alpha_2 \tau_2, \quad \tau_i = \frac{1}{\nu_i}, \quad i = 1, 2,$$

$D = c/\xi$ — равновесный коэффициент диффузии.

Параметры ξ, τ и a могут рассматриваться в качестве независимых. При этом параметр a может изменяться в пределах от единицы до бесконечности, а параметры ξ и τ — в пределах от нуля до бесконечности. Параметр b может изменяться в пределах от ξ/τ_2 до ξ/τ_1 .

Из соотношения (24) следует, что скорость изменения среднее квадратичного смещения при $t = 0$ равна $6Db$, а с ростом t она постепенно приближается к $6D$. Характерное время, за которое происходит переход от одного значения к другому, равно τ . Физический смысл параметра τ можно выяснить, если рассмотреть систему уравнений (9), (10) при условии, что пространственные градиенты переменных отсутствуют. Если имеется только два типа узлов, эта система сводится к одному уравнению:

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} = -\frac{1}{\tau} \left(\rho_1 - \frac{\alpha_1 \tau_1 \rho^0}{\xi} \right). \quad (25)$$

Отсюда видно, что параметр τ представляет собой время релаксации к локально равновесному распределению.

Характер кривых $\langle r^2 \rangle^0(t)$ определяется способом распределения частиц по узлам разного типа в начальный момент времени, т. е. величиной параметра b . Значения параметра b , большие единицы, соответствуют начальным распределениям частиц, при которых заполнены преимущественно узлы с малым средним временем пребывания. Частицы, расположенные на таких узлах, более подвижны, поэтому при $b > 1$ в начальный момент времени скорость роста среднее квадратичного смещения выше равновесной. По мере того как распределение частиц приближается к равновесному, скорость роста среднее квадратичного смещения уменьшается и постепенно

приближается к равновесной. При $b < 1$ частицы в начальный момент времени располагаются преимущественно на тех узлах, где они менее подвижны. Поэтому при $b < 1$ скорость роста среднеквадратичного смещения в начальный момент времени ниже равновесной, а с течением времени она постепенно увеличивается и приближается к равновесной. При больших по сравнению с τ временах все кривые (24) асимптотически приближаются к прямым, соответствующим росту среднеквадратичного смещения с равновесной скоростью.

Из соотношения (24) следует, что при $t = \tau$ среднеквадратичное смещение равно

$$6 [b - (b - 1) \exp(-1)] \frac{c\tau}{\xi}.$$

Численное значение этого выражения может изменяться в широких пределах за счет изменения параметров τ и ξ . Если параметры τ и ξ являются величинами одного порядка, то среднеквадратичное смещение при $t = \tau$ будет микроскопической величиной. Заметный рост среднеквадратичного смещения начнется только при $t \gg \tau$, в области линейной зависимости $\langle r^2 \rangle$ от t . В этом случае отклонения от классического поведения наблюдаться не будут. Если же параметр τ на много порядков больше параметра ξ , то среднеквадратичное смещение при $t = \tau$ может достигать макроскопических значений. В этом случае заметный рост среднеквадратичного смещения будет происходить также и в области нелинейной зависимости $\langle r^2 \rangle$ от t , т.е. будет наблюдаться аномальная диффузия.

Таким образом, согласно рассматриваемой модели, причина аномальной диффузии заключается в том, что время установления локально равновесного распределения частиц по узлам разного типа, τ , и среднее время пребывания молекулы в одном узле, ξ , являются величинами разного порядка. Из формул, связывающих параметры τ и ξ с параметрами α_i и τ_i , следует, что условие $\tau \gg \xi$ выполняется в том случае, если выполняются условия $\tau_2 \gg \tau_1$ и $\alpha_2 \ll 1$, т.е. когда узлы с большим временем пребывания присутствуют в малом количестве.

6. УРАВНЕНИЕ С ДРОБНОЙ ПРОИЗВОДНОЙ

Как известно [6, 14], уравнение с дробной производной по времени получается из уравнения (20),

если функцию $\varphi(u)$ положить равной функции $\psi(u)$, а функцию $\psi(u)$ задать в виде

$$\psi(u) = \frac{1}{1 + (Au)^n}, \quad (26)$$

где A и n — параметры, удовлетворяющие условиям $A > 0, 1 > n > 0$.

Требование, чтобы функция $\varphi(u)$ была равна функции $\psi(u)$, в рамках рассматриваемой модели может быть физически оправдано, если все потенциальные барьеры имеют одну и ту же высоту, т.е. если $\gamma_i = \alpha_i$. Действительно, в таком случае условие $\varphi(u) = \psi(u)$ означает, что $\beta_i = \alpha_i$, т.е. что в начальный момент времени частицы распределены по узлам разного типа случайным образом.

Из условия (26) можно найти распределение узлов по частотам. Для этого нужно решить интегральное уравнение

$$\int_0^\infty \frac{\nu}{u + \nu} \gamma(\nu) d\nu = \frac{1}{1 + (Au)^n}. \quad (27)$$

Решение находится методами теории функций комплексного переменного и выглядит следующим образом:

$$\gamma(\nu) = \frac{\sin(n\pi)}{\pi\nu [(A\nu)^n + (A\nu)^{-n} + 2 \cos(n\pi)]}. \quad (28)$$

Эта функция распределения является непрерывной и отлична от нуля при частотах, изменяющихся в пределах от нуля до бесконечности. Очевидно, в рамках рассматриваемой модели такая функция распределения лишена физического смысла, поэтому уравнение с дробной производной может рассматриваться только в качестве аппроксимации, пригодной для приближенного описания реальных процессов в ограниченном временном интервале. На больших временах это уравнение не может использоваться, так как оно дает степенной рост среднеквадратичного смещения, в то время как согласно уравнению (22) рост должен быть линейным.

Обычно предполагается, что частота может быть представлена в виде

$$\nu = \nu_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right),$$

где ν_0 — постоянный множитель, E — энергия активации. В таком случае распределение узлов по частотам (28) можно преобразовать в распределение узлов по энергиям активации:

$$\gamma(E) = \frac{\sin(n\pi)}{\pi RT [(z)^n + (z)^{-n} + 2 \cos(n\pi)]}, \quad (29)$$

где

$$z = \frac{1}{\nu_0} \exp \frac{\xi_E - E}{RT};$$

ξ_E — среднее значение энергии активации, которое связано с параметром A следующим образом:

$$A = \frac{1}{\nu_0} \exp \frac{\xi_E}{RT}. \quad (30)$$

Хотя по физическому смыслу распределение (29) не должно зависеть от температуры, в данном случае такая зависимость есть. Это означает, что в строгом смысле уравнение с дробной производной нельзя применять для описания данных при разных температурах. Если мы все же хотим использовать его для этой цели в качестве аппроксимационного уравнения, то зависимости параметров A и n от температуры можно найти, если выразить их через среднее значение и дисперсию распределения (29). Параметр A будет выражаться по формуле (30), а параметр n — по формуле

$$n = \left[1 + \frac{3\sigma^2}{(\pi RT)^2} \right]^{-1/2}, \quad (31)$$

где σ^2 — дисперсия распределения (29). Параметры ξ_E и σ^2 должны рассматриваться в качестве постоянных, не зависящих от температуры.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенная в данной работе модель аномального стохастического переноса, благодаря наличию в ней большого числа параметров, может использоваться для описания процессов с разнообразными характеристиками. В этом отношении она отличается от уравнений с дробными производными, которые могут описывать только узкий класс аномальных процессов переноса. Поскольку все параметры, фигурирующие в полученных уравнениях, имеют ясный физический смысл и отражают реальные свойства среды, в которой идет процесс переноса, они, в принципе, могут использоваться не только для формального описания экспериментальных данных, но и для извлечения из этих данных информации о

микроскопической структуре среды. Вместе с тем идентификация большого числа параметров представляет собой серьезную проблему, поэтому практическое использование предлагаемой модели сопряжено с определенными сложностями. Однако обойти эту проблему нельзя, так как аномальные процессы переноса, как правило, наблюдаются в средах со сложной структурой, охарактеризовать которую при помощи небольшого числа параметров невозможно.

ЛИТЕРАТУРА

1. W. D. Luedtke and U. Landmann, Phys. Rev. Lett. **82**, 3835 (1999).
2. J.-P. Bouchaud and A. Georges, Phys. Rep. **195**, 127 (1990).
3. M. B. Isichenko, Rev. Mod. Phys. **64**, 961 (1992).
4. R. Metzler and J. Klafter, Phys. Rep. **339**, 16 (2000).
5. В. Ю. Забурдаев, К. В. Чукбар, ЖЭТФ **121**, 295 (2002).
6. А. И. Саичев, С. Г. Уткин, ЖЭТФ **126**, 502 (2004).
7. И. А. Драников, П. С. Кондратенко, А. В. Матвеев, ЖЭТФ **125**, 1085 (2004).
8. P. W. Shmidlin, Phys. Rev. B **16**, 2362 (1977).
9. J. Noolandi, Phys. Rev. B **16**, 4474 (1977).
10. E. C. Aifantis, Acta Metall. **27**, 683 (1979).
11. J. B. Leblond and D. Dubois, Acta Metall. **31**, 1459 (1983).
12. V. Pereyra, G. Zgrablich, and V. P. Zhdanov, Langmuir **6**, 691 (1990).
13. П. Резибуа, М. ДеЛенер, *Классическая кинетическая теория жидкостей и газов*, Мир, Москва (1980).
14. A. I. Saichev and G. M. Zaslavsky, Chaos **7**, 753 (1997).