

## Эффекты “памяти” в стохастическом транспорте

В. Ю. Забурдаев, К. В. Чукбар<sup>1)</sup>

Российский научный центр “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

Поступила в редакцию 24 апреля 2003 г.

Рассмотрены эффекты “памяти” в стохастическом переносе – зависимость вида описывающих его уравнений от макроскопического времени. Получены уравнения, явно учитывающие микроскопические особенности задачи, без которых невозможно адекватное описание процесса переноса, предложены способы их решения и проанализированы их асимптотические свойства.

PACS: 05.40.Fb; 05.60.Cd

В последнее время наблюдается всплеск интереса к процессам стохастического переноса, связанный с исследованием пространственной и временной нелокальности в этом явлении [1–4]. Использование адекватного для такого круга явлений математического языка дробных производных [5, 6] и устойчивых распределений [1, 7] позволило существенно обобщить и расширить физическую теорию случайного переноса по сравнению с примитивной диффузионной картиной.

Существует много различных физических причин, приводящих к упомянутым выше нелокальностям (дробным производным) в уравнениях переноса (см. обсуждение этого вопроса в [8, 9]). Одной из наиболее часто встречающихся является наличие медленно спадающих пространственных и временных корреляций в движении отдельных частиц расплывающегося облака. Поскольку в таких случаях макроскопическое (для облака) уравнение переноса выводится как раз из модели случайных блужданий отдельных частиц (не обязательно являющихся обычными частицами), то они имеют принципиально асимптотический смысл. В предыдущей работе [8], посвященной в основном эффектам, привносимым конечностью скорости блужданий, мы уже упоминали о нетривиальности такого асимптотического перехода и сложной зависимости макроскопического транспорта от микроскопических деталей и начального условия. Теперь мы хотим детально выявить физические последствия этой идеологической и математической нетривиальности.

Очевидно, что у любых физических процессов, удовлетворяющих принципу причинности, следует ожидать преемственности эволюции: если решение описывающих процесс уравнений функциональ-

но связано с начальным состоянием через функцию Грина  $G_t: n(x, t) = G_t \cdot n(x, 0)$ , то

$$\begin{aligned} G_{t_1+t_2} * n(t=0) &= G_{t_2} * n(t=t_1) = \\ &= G_{t_2} * (G_{t_1} * n(t=0)). \end{aligned} \quad (1)$$

Иными словами, рассматривая достигнутое в какой-либо момент  $t_1$  состояние как новое начальное условие, мы не нарушаем плавности эволюции. Тем не менее, уравнения, обсуждаемые во всех известных нам работах, посвященных нелокальному недиффузионному транспорту с дробной временной производной, включая недавний прекрасный обзор [4], таким свойством в строгом смысле не обладают. Это неприятное обстоятельство практически никак не обсуждается в литературе, тогда как именно оно должно было бы помочь осознанию скрытого дефекта описания – неполноты представления состояния облака частиц только его макроскопической концентрацией  $n(x, t)$ . Интересно, что схожие проблемы возникают при рассмотрении сильносвязанных кулоновских систем в рамках квантовой кинетической теории, где проявляется сильная зависимость решений от начальных корреляций [10].

Попытка разобраться в явлении приводит к парадоксальному выводу о том, что даже в тех случаях, когда эффективное уравнение для макроскопической эволюции сводится к классическому уравнению диффузии с обычной первой производной по времени (очевидно, удовлетворяющему (1)), дефект часто всего лишь скрыто замечен под ковер. На самом деле время выхода на макроскопический режим эволюции существенно зависит от начального условия и может быть много больше микроскопического времени  $\langle \tau \rangle$ , характеризующего блуждание отдельных частиц (см. ниже). Тем более это характерно для субдиффузионных временных операторов.

Таким образом, обсуждаемые в данной работе эффекты “памяти” заключаются не в наличии уже при-

<sup>1)</sup>e-mail: chukbar@dap.kiae.ru

вычной временной нелокальности (дробной производной) в эффективном транспортном уравнении, а в зависимости от макроскопического (см. ниже) времени  $t$  самого вида этого уравнения.

Для вывода уравнений переноса, мы, как и в [6, 8], будем использовать стандартную модель случайных блужданий. Рассматривается одномерное движение частиц по прямой  $x$ , характеризуемое вероятностными законами  $g(|x|)$  и  $f(t)$ : частицы, находящиеся в любой точке (скажем,  $x_0$ ) могут совершать мгновенный перескок в соседние точки таким образом, что вероятность попасть в интервал  $(x_0 + x, x_0 + x + dx)$  равна  $g(x)dx$ , причем происходит это перемещение после некоторого процесса ожидания, так что вероятность покинуть свое местонахождение в интервале  $(t, t + dt)$  равна  $f(t)dt$ . Для удобства промежуточных выкладок, без потери общности, выберем эти функции в виде [6, 8]

$$g(x) = \frac{\Gamma(\beta + 1/2)}{\sqrt{\pi} \Gamma(\beta)} \frac{1}{(1 + x^2)^{\beta+1/2}}; \quad f(t) = \frac{\gamma}{(1 + t)^{\gamma+1}}. \quad (2)$$

Здесь  $\Gamma$  – гамма-функция Эйлера, численные коэффициенты определяются условиями нормировки  $g$  и  $f$  на 1. Существенными для дальнейшего являются лишь степенные показатели “хвостов” функций, параметризуемые положительными индексами  $\beta$  и  $\gamma$ .

Частицы, находящиеся в данной точке  $x$  “помнят” момент своего прибытия сюда, так что их пространственная плотность  $n$  представляет собой интеграл некоторого распределения  $N$  по “времени жизни”  $\tau$ :

$$n(x, t) = \int_0^{\infty} N(x, t, \tau) d\tau.$$

Переход в последующее движение мы определим в терминах “вероятности дожить до  $\tau$ ”, которая просто связана с уже введенной функцией  $f$ :

$$F(\tau) = 1 - \int_0^{\tau} f(t) dt.$$

Тогда поток частиц  $Q(x, t)$ , выходящий (в обе стороны и на все расстояния) из данной точки, можно выразить, используя формулу условной вероятности (см. [6]):

$$Q(x, t) = \int_0^{\infty} \frac{N(x, t, \tau)}{F(\tau)} f(\tau) d\tau. \quad (3)$$

Теперь мы можем выписать уравнение баланса для находящихся в данный момент в данной точке частиц:

$$n(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x') \int_0^t Q(x - x', t - t') F(t') dt' dx' + \int_t^{\infty} \frac{N_0(x, \tau - t)}{F(\tau - t)} F(\tau) d\tau. \quad (4)$$

Последний член в правой части уравнения отвечает за влияние начального распределения частиц  $N_0(x, \tau) \equiv N(x, 0, \tau)$  по времени жизни. Система (3), (4) полностью описывает ситуацию и, очевидно, удовлетворяет условию (1). Отметим, что если:  $N_0 = n_0 \delta_+(\tau)$  (“сдвинутая” дельта – функция Дирака:  $\int_0^{\infty} \delta_+(\tau) d\tau = 1$ ), то в результате прибытия новых частиц в каждой точке мгновенно (при любых  $t > 0$ ) формируется автомоделный профиль

$$N(t, \tau) = \theta(t - \tau) P(t - \tau) F(\tau) \quad (5)$$

с коррелированной зависимостью от  $t$  и  $\tau$ , где  $P$  – “входящий” поток,  $\theta(t)$  – функция Хевисайда. В этом случае от системы (3), (4) можно перейти к одному базовому уравнению для макроскопической плотности  $n$  [6]:

$$n(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x') \times \times \int_0^t f(t') n(x - x', t - t') dt' dx' + F(t) n_0(x). \quad (6)$$

Функции Грина этого уравнения выглядят следующим образом:

$$G_{k,p} = \frac{F_p}{1 - f_p g_k}, \quad (7)$$

где символ  $[\cdot]_{k,p}$  обозначает фурье- (или) лаплас-компоненту соответствующей функции.

Уравнение переноса может быть также записано в терминах только  $n$ , если  $f = \mu \exp(-\mu t)$  ( $\mu = 1/\langle \tau \rangle$ ), тогда  $F$  и  $f$  (и, следовательно,  $Q$  и  $n$ ) просто пропорциональны друг другу. Причина такой выделенности экспоненциального закона абсолютно прозрачна: только при нем в единицу времени выбывает фиксированный процент сидящих частиц, не зависимо от того, когда они прибыли сюда, то есть все заключенные “в общий мешок”  $\int_0^{\infty} N(\tau) d\tau$  находятся в равных условиях. В остальных случаях “розыгрыш в рулетку” зависит от времени ожидания  $\tau$  и нельзя пренебрегать деталями распределения  $N(\tau)$ .

В большинстве работ уравнение (6) выписывается сразу, что должно подразумевать либо выполнение одного из двух указанных выше условий, либо иную заложенную модель (что авторами этих работ не обсуждается). В общем случае уравнение (6) справедливо лишь в некотором асимптотическом смысле – должно пройти достаточно времени (см. ниже), прежде чем автомоделная зависимость (5) займет большую часть профиля  $N(\tau)$  и начнет играть доминирующую роль в  $Q$  по сравнению с  $N_0$ . Нетрудно убедиться, что для (6) условие (1) выполняется, только если  $f = \mu \exp(-\mu t)$ . В остальных случаях для адекватного описания процесса переноса необходимо пользоваться исходной системой (3), (4). Ниже мы предложим способ точного решения этой системы и покажем, как начальное распределение частиц по времени жизни отражается на последующей эволюции.

Для начала представляется удобным разбить  $N(x, t, \tau)$  на два слагаемых (см. (4)):

$$N_1(x, t, \tau) = \frac{N_0(x, \tau - t)F(\tau)}{F(\tau - t)} \cdot \theta(\tau - t); \quad (8)$$

$$N_2(x, t, \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x')F(\tau)Q(x - x', t - \tau)\theta(t - \tau)dx', \quad (9)$$

$\tau < t.$

$N_1$  описывает частицы, живущие в данной точке времени  $\tau > t$ , то есть частицы начального распределения  $N_0$ , которые досидели до времени  $t$ .  $N_2$  – это профиль частиц, формируемый потоком  $Q(x, t)$ , вклад в который дают оба слагаемых  $N_1$  и  $N_2$ . Уравнение для  $N_2$  выглядит аналогично (4) и следует из формулы для потока (3):

$$N_2(x, t, \tau) = F(\tau) \int_{-\infty}^{+\infty} g(x') \times \left\{ \int_0^{t-\tau} \frac{N_2(x - x', t - \tau, \tau_1) f(\tau_1)}{F(\tau_1)} d\tau_1 + \int_{t-\tau}^{+\infty} \frac{N_1(x - x', t - \tau_1, \tau_1) f(\tau_1)}{F(\tau_1)} d\tau_1 \right\} dx'. \quad (10)$$

Подставим (8) и (9) в (10). Совершим в нем преобразование Лапласа по временной и Фурье по пространственной переменным, что избавит нас от сверточных интегралов. После этого снова воспользуемся

(9) и в получившемся выражении в правой части выделим слагаемое с  $N_{2p,k}$ . Решив относительно него линейное уравнение, получим

$$N_{2p,k}(\tau) = \frac{g_k F(\tau) \exp(-p\tau)}{1 - f_p g_k} \times \left( \int_t^{+\infty} \frac{N_{0k}(\tau_1 - t) f(\tau_1) d\tau_1}{F(\tau_1 - t)} \right)_p. \quad (11)$$

Плотность частиц также представим в виде суммы двух слагаемых  $n = n_1 + n_2$ , где

$$n_1 = \int_t^{\infty} N_1(x, t, \tau) d\tau, \quad n_2 = \int_0^t N_2(x, t, \tau) d\tau.$$

Так как  $N_2$  зависит от своих переменных автомоделным образом (9) (ср.(5)), мы можем написать:

$$n_{2p,k} = \frac{F_p N_{2p,k}}{F(\tau) \exp(-p\tau)}. \quad (12)$$

Теперь, пользуясь формулами (8), (11), а также связью  $f_p(t + t') = F(t') - pF_p(t + t')$  (здесь и далее индекс  $p$  обозначает преобразование Лапласа по переменной  $t$ ), после несложных преобразований получим

$$n_{p,k} = \frac{1}{1 - f_p g_k} \left\{ F_p n_{0k} + (1 - g_k) \times \int_0^{\infty} N_{0k}(\tau) \left( \frac{F(\tau + t)}{F(\tau)} - F(t) \right)_p d\tau \right\}. \quad (13)$$

Заметим, что первый член в фигурных скобках дает выражение для плотности, которое является решением (6) (см. [6]), а второй, следовательно, демонстрирует зависимость решения от начального распределения по времени жизни. Снова отметим, что при  $F(t) = \exp(-\mu t)$  второе слагаемое обращается в нуль, то есть зависимость от микроскопического распределения пропадает.

Для того чтобы продемонстрировать отличие (13) от (6), рассмотрим пример с начальным условием  $N_0(x, \tau) = n_0(x)\delta_+(\tau - t_0)$ , где  $t_0$  – некоторое неотрицательное время задержки. В этом случае решению можно придать иной компактный вид. Подставим начальное условие в (11) и с учетом (12) получим:

$$n_{2p,k} = \frac{g_k}{F(t_0)} \frac{F_p n_{0k}}{1 - f_p g_k} f_p(t + t_0), \quad n_1 = \frac{F(t + t_0) n_0(x)}{F(t_0)}.$$

И, наконец, выпишем выражение для плотности частиц  $n(x, t)$ :

$$n(x, t) = \frac{1}{F(t_0)} \left( \int_{-\infty}^{+\infty} dx' g(x') \times \right. \\ \left. \times \int_0^t f(\tau + t_0) \tilde{n}(x - x', t - \tau) d\tau + F(t + t_0) n_0(x) \right),$$

где через  $\tilde{n}(x, t)$  мы обозначили уже известное решение (6), к которому  $n(x, t)$  асимптотически стремится при больших  $t$ . Однако первоначальная стадия эволюции плотности частиц  $t < t_0$ , которая в зависимости от  $t_0$  может быть достаточно продолжительной, происходит иначе. Для наглядности рассмотрим случай  $\beta, \gamma > 1$ . При этом функция  $f$  обладает конечным первым моментом  $\langle \tau \rangle$  и (средним временем ожидания), а  $g$  – конечным вторым моментом  $\langle x^2 \rangle$  (средним квадратом смещения), а значит после разложения подынтегрального выражения с учетом малостей  $t \gg \langle \tau \rangle$ ,  $x \gg \sqrt{\langle x^2 \rangle}$  в уравнении (6) мы бы получили обычное уравнение диффузии с коэффициентом  $D = \langle x^2 \rangle / 2\langle \tau \rangle$ . Теперь это не так. Раскладывая выражение для  $n_1$  по малому параметру  $t/t_0 \ll 1$ , мы видим, что число таких частиц убывает линейно со временем по закону

$$n_1(x, t) \simeq n_0(x)(1 - \gamma t/t_0), \quad (14)$$

что приводит, соответственно, к линейному росту числа частиц  $n_2$ , и при  $t \gg \langle \tau \rangle$  эволюция плотности  $n_2$  описывается уравнением диффузии с постоянным источником в правой части:

$$\frac{\partial n_2}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n_2}{\partial x^2} + \varphi(x);$$

$$\varphi(x) = \frac{\gamma}{t_0} \int_{-\infty}^{+\infty} g(x') n_0(x - x') dx', \quad D = \frac{\langle x^2 \rangle}{2\langle \tau \rangle}. \quad (15)$$

Его решение имеет вид (см., например, [11])

$$n_2(x, t) = \int_0^t \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\varphi(\xi, \tau)}{\sqrt{4\pi D(t - \tau)}} \exp\left(-\frac{(x - \xi)^2}{4D(t - \tau)}\right) d\xi d\tau. \quad (16)$$

Если за  $x_0$  мы обозначим характерную ширину функции  $\varphi(x)$ ,  $t_D = x_0^2/D$  – соответствующее ей диффузионное время, то при выполнении строгих неравенств  $t_D \ll t \ll t_0$  в (15) можно заменить  $\varphi$  на дельта-функцию и, взяв интеграл по координате, прийти к еще более простому выражению.

Следовательно, введение задержки  $t_0$  в начальном распределении по времени жизни приводит к отклонению от привычной картины на интервале  $\langle \tau \rangle < t < t_0$  даже в области параметров  $\beta, \gamma$ , отвечающих обычной диффузии – частицы начального распределения убывают согласно (14) и служат при этом источником для формирования автомоделного профиля  $n_2$  по закону (16). Это связано с отсутствием внутреннего масштаба у степенной функции. Так, например, экспоненциальный закон характеризуется  $\langle \tau \rangle$ , которое показывает, что значение функции в момент времени  $t = t_0 + \langle \tau \rangle$  будет в  $e$  раз меньше, чем при  $t = t_0$  и не зависит от выбора  $t_0$ . Нетрудно убедиться, что для степенной функции это не так. Более того, при увеличении  $t_0$  требуется ждать все большее время  $t_1 \sim t_0$ , по прошествии которого значение функции уменьшится, например, в два раза, и при  $t_0 \rightarrow \infty$  время  $t_1 \rightarrow \infty$ .

Обратимся теперь к свойству (1). Проблема отличается от предыдущей тем, что начальное распределение  $N_0$  задано не произвольно, а возникает из предварительной эволюции  $\delta_+(\tau)$  в рамках (3), (4) в течение  $t_1$ . В случае, когда процесс переноса асимптотически описывается обычным уравнением диффузии, время установления автомоделного решения определяется микроскопическим временем  $\langle \tau \rangle$ , то есть (1) выполняется уже при  $t_1, t_2 \gg \langle \tau \rangle$ . Для субдиффузионного режима это не так. Применим к выражению (1) преобразование Лапласа по переменным  $t_1$  и  $t_2$ , воспользовавшись его свойством

$$[f(t_1 + t_2)]_{p_1, p_2} = \frac{[f(t_1)]_{p_1} - [f(t_2)]_{p_2}}{p_2 - p_1}.$$

Тогда должно быть выполнено соотношение:

$$\frac{G_{p_1} - G_{p_2}}{p_2 - p_1} = G_{p_2} \cdot G_{p_1}.$$

Нетрудно убедиться, что для функции Грина вида (7) оно справедливо только при  $p_2 \ll p_1$  или  $t_2 \gg t_1$ . Это означает, что в зависимости от продолжительности первого этапа эволюции  $t_1$  для установления прежнего автомоделного решения требуется время  $t_2 \sim t_1$ . Реальный процесс переноса на временах  $t_2 \ll t_1$  может быть описан с помощью уравнений с источником в правой части, как это было сделано для модельной задачи с задержкой по времени (см. выше). Однако в отличие от рассмотренного примера, в данном случае убывание  $n_1$  и, соответственно, увеличение числа частиц  $n_2$  будет более быстрым (при малых  $t$ ), поскольку теперь  $N_0(\tau)$  не сосредоточено на дальней

границе  $\tau = t_1$ , а занимает весь интервал  $(0, t_1)$ . Так, в уравнении для  $n_2$  (ср. [12])

$$\frac{\partial^\gamma n_2(x, t)}{\partial t^\gamma} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 n_2}{\partial x^2} + q(x, t)$$

источник  $q(x, t)$  приводит к росту  $n_2$  по закону

$$\int_{-\infty}^{+\infty} n_2(x, t) dx \propto t^{1-\gamma}.$$

Таким образом, мы показали, что существенное влияние на процесс стохастического переноса оказывают микроскопические особенности начального распределения, которые необходимо явно учитывать в транспортном уравнении и которые приводят к проявлению эффектов памяти – зависимости самого вида уравнения от макроскопического времени. Эта дополнительная степень свободы позволяет в значительной мере изменять первоначальную стадию эволюции системы, которая может быть весьма продолжительной, что мы и продемонстрировали на модельном примере, когда даже в случае диффузионных параметров задачи (для функций из класса (2)) эффективные уравнения отличны от классической диффузии. Частицы начального условия линейно убывают со временем и при этом формируют профиль, эволюция которого описывается уравнением диффузии с постоянным источником. Причиной этому служит отсутствие внутреннего масштаба у степенной функции, описывающей время ожидания частицы в точке при ее случайных блужданиях. Учет микроскопического распределения позволяет выправить дефект – нарушение преемственности эволюции в асимптотическом уравнении, и описать переходный процесс формирования профиля частицами начального условия с помощью уравнений субдиффузии, но с источ-

ником, зависящим от временем. Можно сказать, что нулевого момента функции распределения частиц, то есть их полного числа, недостаточно для корректного описания процесса. Необходимо представить ее в виде суммы, каждое из слагаемых которой соответствует своему типу частиц. Простой иллюстрацией такого подхода служит начальное распределение по времени жизни в виде "гребенки" из сдвинутых дельта-функций. Однако оказывается, что разбиение частиц даже на два класса и учет следующего момента функции распределения – времени перехода одного сорта частиц в другой, уже значительно повышают точность уравнений.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований # 03-02-16765 и гранта НШ-2292.2003.2.

1. E. W. Montroll and M. F. Schlesinger, in *Studies in Statistical Mechanics*, Vol.2, Eds. J. Leibowitz and E. W. Montroll, North-Holland, Amsterdam, 1984, p. 1.
2. J.-P. Bouchand and A. Georges, *Phys. Rep.* **195**, 127 (1990).
3. M. B. Isichenko, *Rev. Mod. Phys.* **64**, 961 (1992).
4. J. Klafter and R. Metzler, *Phys.Rep.* **339**, 1 (2000).
5. G. M. Zaslavsky, *Physica* **D76**, 110 (1994).
6. К. В. Чукбар, *ЖЭТФ* **108**, 1875 (1995).
7. В. М. Золотарев, В. В. Учайкин, В. В. Саенко, *ЖЭТФ* **115**, 1411 (1999).
8. В. Ю. Забурдаев, К. В. Чукбар, *ЖЭТФ* **121**, 299 (2002).
9. К. В. Чукбар, *ЖЭТФ* **109**, 1335 (1996).
10. D. Semkat, D. Kremp, and M. Bonitz, *J. Math. Phys* **41** 7458 (2000).
11. В. С. Владимиров, *Обобщенные функции в математической физике*, М.: Наука, 1976, с. 218.
12. Л. А. Большов, А. М. Дыхне, П. С. Кондратенко, *Письма в ЖЭТФ* **75**, 291 (2002).