01

Фрактальные блуждания и блуждания на фракталах

© В.В. Учайкин

Ульяновский государственный университет,
432700 Ульяновск, Россия
e-mail: uchaikin@sv.uven.ru

(Поступило в Редакцию 25 декабря 2002 г. В окончательной редакции 4 декабря 2003 г.)

Рассматривается одномерное блуждание частицы, совершающей мгновенные скачки между случайно распределенными „атомами" среды, в которых она пребывает случайное время. Случайные расстояния между соседними парами атомов и промежутки времени между перескоками взаимно независимы. Исследуется асимптотическое ($t \to \infty$) поведение этого процесса в связи с проблемой интерпретации обобщенного уравнения диффузии с дробными производными (УДДП). Показано, что в рассматриваемой модельной задаче интерпретация УДДП как уравнения, описывающего блуждания (диффузию) во фрактальной среде, неверна. Причина в том, что при выводе УДДП предполагается независимость последовательных скачков (фрактальные блуждания), тогда как в рассматриваемом случае они коррелированы: частица, покидающая „атом" в направлении, обратном предыдущему, проходит тот же самый путь до попадания в атом.

Введение

Появившийся и энергично распространяющийся в последнее десятилетие термин „аномальная диффузия", или как синоним „странная кинетика", используется для обозначения таких процессов, в которых диффузионный пакет расплывается по закону, отличному от нормального случая $\Delta(t) \propto t^{\gamma}$. Чаще всего используется аппроксимация $\Delta(t) \propto t^{1/\gamma}$, где показатель γ отличен от 1/2. К числу таких процессов относятся перенос зарядов в аморфных полупроводниках, диффузия в полимерных и пористых материалах, в турбулентных и вращающихся потоках, в межзвездной среде и скальных породах и др. [1–3].

Аналитическое описание таких процессов часто осуществляется посредством обобщенного уравнения диффузии с дробными производными (УДДП), в одномерном случае имеющего вид

$$\frac{\partial^{\beta} p(x,t)}{\partial t^{\beta}} = -D\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)^{\alpha/2} p(x,t) + \frac{t^{-\beta}}{\Gamma(1-\beta)}\,\delta(x),$$

$$0 < \alpha \le 2, \quad 0 < \beta \le 1. \tag{1}$$

Здесь $\Gamma(z)$ — гамма-функция Эйлера,

$$\frac{\partial^{\beta} p(x,t)}{\partial t^{\beta}} = \frac{1}{\Gamma(1-\beta)}\frac{\partial}{\partial t}\int_0^t \frac{p(x,\tau)d\tau}{(t-\tau)^{\beta}}$$

— производная Римана-Лиувилля дробного порядка β, $(-\partial^2/\partial x^2)^{\alpha/2}$ — дробная степень оператора второй производной [4]. Показатели α и β связаны с распределениями случайных пробегов R и времен Θ пребывания частицы в ловушках-атомах асимптотическими соотношениями

$$\mathrm{P}\{R > r\} \propto r^{-\alpha}, \quad r \to \infty$$

и

$$\mathrm{P}\{\Theta > t\} \propto t^{-\beta}, \quad r \to \infty.$$

Столь характерные свойства интерпретируются как фрактальность среды (наличие больших пустот на всех масштабах) и память частицы (вероятность покинуть атом в единицу времени зависит от того, когда частица в него попала). Уточнению первой, фрактальной интерпретации и посвящена настоящая работа.

Одномерный фрактальный газ

В работе [5] случайное распределение $\{X_j\} = \ldots, X_{-2}, X_{-1}, X_0, X_1, X_2, \ldots$ точечных атомов на прямой, обладающее свойствами 1) $X_0 = 0$; 2) $X_i < X_j$, если $i < j$; 3) $X_j - X_{j-1} = R_j$ — взаимно независимые, одинаково распределенные случайные величины с общей функцией распределения $F(x)$, названо одномерным лоренц-газом. Легко видеть, что распределение вероятности числа атомов $N_+(x)$ в промежутке $(0, x]$ выражается через многократные свертки распределения $F(x)$ соотношением

$$W(n,x) \equiv \mathrm{P}\{N_+(x) = n\} = F_n(x) - F_{n+1}(x).$$

Аналогичное соотношение имеет место и для распределения числа частиц $N_-(x)$ в интервале $[-x, 0)$. Полное число атомов на отрезке $[-x, x]$ равно сумме

$$N(x) = N_+(x) + N_-(x) + 1.$$

Выбирая разные функции распределения $F(x)$, получаем различные модели случайной среды. Так, использование ступенчатой функции Хэвисайда

$$F(x) = \mathrm{H}(x-a) \equiv \begin{cases} 0, & x < a, \\ 1, & x \ge a \end{cases}$$

дает одномерную детерминированную решетку, экспоненциальное распределение

$$F(x) = 1 - \exp\{-\mu x\}$$

приводит к независимо распределенным атомам (пуассоновская модель).

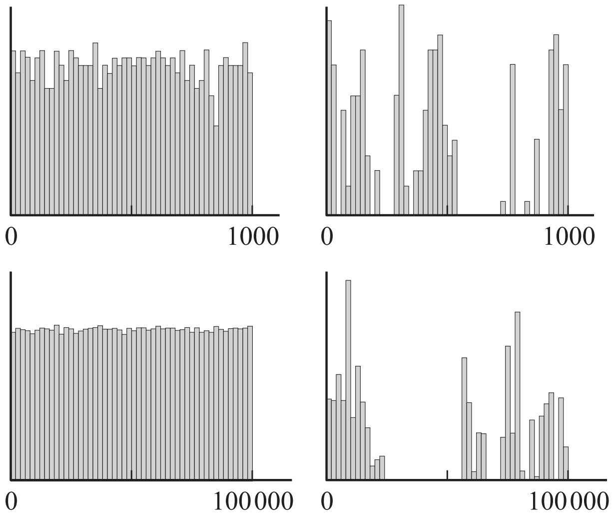

Рис. 1. Регулярное (слева) и фрактальное (справа, $\alpha = 0.75$) распределения атомов на прямой в разных масштабах.

В любом случае, если математическое ожидание случайной величины R конечно, мы получаем в асимптотике больших x $\langle N(x)\rangle \propto x$ и относительные флуктуации $\Delta(x)/\langle N(x)\rangle \to 0$. Это значит, что если $f\big(N(x), x\big)$ — некоторая гладкая функция случайной переменной N, то при $x \to \infty$ $f\big(N(x), x\big) \to f\big(\langle N(x)\rangle, x\big)$, т. е. с увеличением толщины слоя x происходит самоусреднение

$$\langle f\big(N(x), x\big)\rangle \to f\big(\langle N(x)\rangle, x\big). \tag{2}$$

Пусть теперь

$$1 - F(x) \sim \frac{A}{\Gamma(1-\alpha)}\, x^{-\alpha}, \qquad x \to \infty \qquad \alpha < 1. \tag{3}$$

В этом случае среднее расстояние между атомами бесконечно, реальные же расстояния будут конечными в любой реализации случайной среды. Бесконечность математического ожидания R приводит к тому, что на всех масштабах будут наблюдаться пустоты вперемежку со сгущениями — кластерами (свойство, которое назвали перемежаемостью) (рис. 1). Применение обобщенной предельной теоремы, основанной на теории устойчивых законов [6], приводит к следующему результату:

$$\sum_{i=1}^{n} W(i, x) \sim \int\limits_0^z w_\alpha(z)dz, \qquad x \to \infty, \tag{4}$$

где $z = n/\langle N(x)\rangle$,

$$w_\alpha(z) = \frac{z^{-1-1/\alpha}}{\alpha\Gamma(1+\alpha)}\, g^+\left(\frac{z^{-1/\alpha}}{\Gamma(1+\alpha)}, \alpha.\right)$$

Здесь $g^+(z, \alpha)$ — сосредоточенная на положительной полуоси $z > 0$ плотность распределения вероятностей, преобразование Лапласа которой имеет вид

$$\int\limits_0^\infty g^+(z, \alpha)e^{-\lambda z}dz = e^{-\lambda^\alpha}.$$

Нетрудно видеть, что удовлетворяющий условию (3) лоренц-газ обладает следующими свойствами: 1) все атомы равноправны и все процессы $N(X_j, X_j + x)$ статистически эквивалентны $N(X_j, X_j + x) \stackrel{d}{=} N(x)$ (символ $\stackrel{d}{=}$ обозначает равенство распределений связываемых им случайных величин); 2) среднее (по ансамблю) число атомов растет с тощиной слоя, отсчитываемой от одного из них по степенному закону,

$$\langle N(x)\rangle \sim N_1 x^\alpha, \qquad 0 < \alpha < 1;$$

3) относительные флуктуации числа атомов в этом слое не убывают с увеличением его толщины, а остаются постоянными.

Эти свойства и дают основание назвать полученную структуру стохастическим фракталом (или фрактальным газом) — самоподобным в вероятностном смысле множеством с фрактальной размерностью α. Для фрактального газа вместо (2) имеет место соотношение

$$\langle f\big(N(x), x\big)\rangle \sim \int\limits_0^\infty f(N_1 x^\alpha z, x) w_\alpha(z)dz \tag{5}$$

при $x \to \infty$. Оно указывает на отсутствие самоусредняемости на фрактальных структурах — главную причину отличия блужданий на фракталах от блужданий в регулярной среде.

Фрактальная память

Аналогичным образом построим случайное множество точек $\{T_j\} = T_1, T_2, T_3, \ldots$ на положительной полуоси времени, характеризующее случайные моменты перескока блуждающей частицы с одного атома на другой. Как и выше, будем полагать случайные величины $\Theta_1 = T$, $\Theta_2 = T_2 - T_1$, $\Theta_3 = T_3 - T_2, \ldots$ взаимно независимыми и одинаково распределенными с функцией распределения $Q(t) = \mathrm{P}\{\Theta < t\}$. Если $Q(t) = 1 - e^{-\mu t}$, $\mu > 0$, случайное множество $\{T_i\}$ образует однородный пуассоновский поток. Это означает, что вероятность совершения частицей скачка в интервале $(t, t + dt)$ не зависит от момента ее предыдущего скачка, другими словами, частица не обладает памятью. Во всех остальных случаях говорят о частице с памятью, а если

$$1 - Q(t) \sim \frac{B}{\Gamma(1-\beta)}\, t^{-\beta}, \qquad t \to \infty, \qquad \beta < 1,$$

то о частице с фрактальной памятью. Все, что было сказано выше относительно ансамбля $\{X_i\}$, справедливо и для ансамбля $\{T_i\}$, в том числе и правило усреднения (5). Если $K(t)$ — случайное число скачков в фиксированном интервале $(0, t]$, то усредненная по статистическому ансамблю $\{T_i\}$ функция $h\big(K(t), t\big)$ удовлетворяет асимптотическому соотношению

$$\langle h\big(K(t), t\big)\rangle \sim \int\limits_0^\infty h(K_1 t^\beta z, t) w_\beta(z)dz, \qquad t \to \infty. \tag{6}$$

Блуждание на фрактале

Рассмотрим теперь процесс одномерного блуждания частицы вдоль оси $0X$. В начальный момент она находится в начале координат. По истечении случайного времени $T_1 = \Theta_1$ она перескакивает с равной вероятностью в один из двух соседних атомов, где пребывает в течение случайного времени Θ_2, после чего вновь совершает скачок в один из соседних атомов (которым теперь может оказаться и атом, находящийся в начале координат, с которого она начинала движение).

Если мы в качестве координаты выберем не x, а номер атома i, а в качестве времени — не t, а номер момента скачка j, то в соответствии с центральной предельной теоремой получим

$$\mathrm{P}\{I < i | J = j\} \sim \frac{1}{\sqrt{2\pi j}} \int_{-\infty}^{i} e^{-x^2/2j} dx, \quad j \to \infty. \quad (7)$$

Этот результат является следствием усреднения по ансамблю случайных траекторий частиц с фиксированными узлами и моментами перескока [7]. Чтобы получить искомую функцию распределения, необходимо усреднить (7) по двум независимым статистическим ансамблям $\{X_i\}$ и $\{T_j\}$, т.е. по случайным значениям I и J индексов i и j соответственно,

$$F(x,t) = \langle\langle P\{I < i | J = i\}\rangle\rangle.$$

Выполняя это усреднение с использованием формул (4) и (5), после некоторых преобразований получим

$$F(x,t) \sim \Xi^{(\alpha,\beta)}\big((Ct)^{-\beta/(2\alpha)}x\big), \quad t \to \infty, \quad x \to \infty,$$

где $C = \mathrm{const}$,

$$\Xi^{(\alpha,\beta)}(x) = \int_0^\infty \Psi^{(2,\beta)}\big((x/y)^\alpha\big) g^+(y,\alpha) dy,$$

а $\Psi^{(2,\beta)}(x)$ — субдиффузионное распределение, выведенное в работе [8].

Соответствующее соотношение для плотностей имеет вид

$$f(x,t) = (Ct)^{-\beta/(2\alpha)} \times \int_0^\infty \Psi^{(2,\beta)}\big((Ct)^{-\beta/(2\alpha)} y^{-\alpha}\big) g^+(y,\alpha) dy. \quad (8)$$

При $\alpha \to 1$ $g^+(y,\alpha) \to \delta(y-1)$ и

$$f(x,t) = (Ct)^{-\beta 2}\Psi^{(2,\beta)}\big((Ct)^{-\beta/2}\big).$$

При $\beta \to 1$ распределение $\Psi^{(2,\beta)}$ переходит в нормальное. При одновременном выполнении этих двух условий мы получаем гауссову форму для самой плотности $f(x,t)$, что соответствует нормальной диффузии в регулярной среде.

Заключение

Чтобы ответить на поставленный в начале статьи вопрос, приведем решение уравнения УДДП (1), описывающее фрактальное блуждание — блуждание, при котором пробеги частицы имеют то же распределение, что и интервалы между атомами рассматриваемой среды, но независимы друг от друга (даже и в том случае, когда блуждающая частица меняет направление). Оно имеет вид

$$f(x,t) = (Ct^\beta)^{-1/\alpha}\Psi^{(\alpha,\beta)}\big((Ct^\beta)^{-1/\alpha}x\big), \quad (9)$$

где $\Psi^{(\alpha,\beta)}$ — плотность, частный тип которой использован в выражении (8).

Сопоставление пространственного распределения (8) частицы, блуждающей на фрактале, с решением УДДП (9) (рис. 2) показывает, что последнее в общем случае нельзя интерпретировать как уравнение, описывающее блуждание на фракталах: в первом случае диффузионный пакет расплывается по закону $\sim t^{\beta/(2\alpha)}$, во втором — по закону $\sim t^{\beta/\alpha}$, т.е. гораздо быстрее. В случае блужданий на фракталах показатель $\gamma = \beta/(2\alpha)$ принадлежит интервалу, меняется в пределах $(0, 1/2)$ и

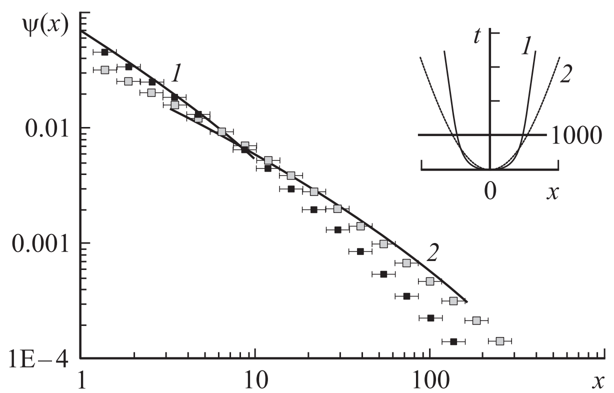

Рис. 2. Пространственные распределения частицы, совершающей блуждания на фрактале (*1*) и фрактальные блуждания (*2*). На вставке — изменение ширины соответствущих диффузионных пакетов со временем. Показатели $\alpha = 0.5$, $\beta = 0.25$.

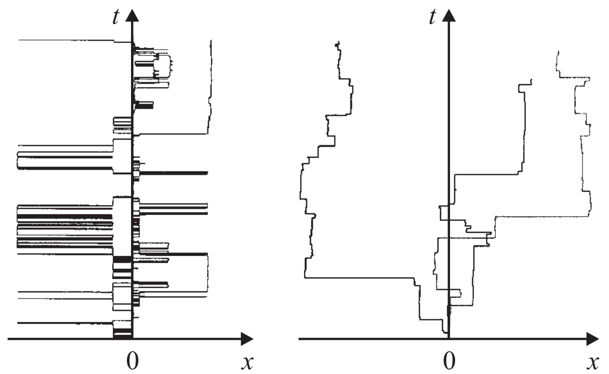

Рис. 3. Траектории частицы, совершающей блуждания на фрактале (слева) и фрактальные блуждания (справа). Показатели $\alpha = 0.5$, $\beta = 1$.

супердиффузионный режим ($\gamma > 1/2$) вообще не возникает. Причину этого различия можно увидеть из рис. 3: фрактально блуждающая частица после вылета из атома всегда может уйти на большое расстояние, тогда как в случае блуждания на фрактале она может оказаться запертой между соседними кластерами, совершая между ними большое число переходов.

Различаются в рассматриваемых случаях и сами формы плотностей распределений $\xi^{(\alpha,\beta)}$ и $\psi^{(\alpha,\beta)}$.

В заключение подчеркнем, что эти выводы справедливы для статистического ансамбля одномерных „застывших" распределений. В многомерном блуждании корреляция между последовательными пробегами может быть выражена слабее и меньше сказываться на различии. Кроме того, ситуация может существенно измениться, если в течение характерного времени пребывания частицы на одном из атомов расположение атомов заметно меняется (как это имеет место при дифффузии в турбулентной среде, отсюда и супердиффузия).

Тем не менее установленные в настоящей работе факты представляются полезными для правильного понимания роли уравнений с дробными производными в проблеме диффузии частиц на фракталах с атомами-ловушками.

Автор благодарен В.В. Саенко за проведение численных расчетов и Е.В. Кожемякиной за подготовку рукописи к изданию.

Работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 0001-00284, 0002-17507) и the Royal Society (grant gt/fSU/JP).

Список литературы

[1] *Bouchud J.-P., Georges A.* // Phys. Rev. 1990. Vol. A41. P. 1156.
[2] *Isichenko M.B.* // Rev. Mod. Phys. 1992. Vol. 64. N 4. P. 961.
[3] *ben-Avraham D., Havlin S.* Diffusion and Reactions in Fractals and Disordered Systems. Cambridge University Press, 2000.
[4] *Самко С.Г., Килбас А.А., Маричев О.И.* Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения. Минск: Наука и техника, 1987.
[5] *Barkai E., Fleurov V., Klafter J.* // Phys. Rev. 2000. Vol. E61. P. 1164.
[6] *Боровков А.А.* Курс теории вероятностей. М.: Наука, 1972.
[7] *Феллер В.* Введение в теорию вероятностей и ее приложения. Т. 1. М.: Мир, 1967.
[8] *Учайкин В.В.* // ЖЭТФ. 1999. Т. 115. Вып. 6. С. 2113.
[9] *Kolokoltsov V., Korolev V., Uchaikin V.* Fractional Stable Distributions. Nottingam Trent University, 2000. N23/00.